

Forschungsprojekte am Vienna Scientific Cluster

Oktober 2009 bis Mai 2012

Inhalt

3 Wissenschaft und Hochleistungsrechnen

4 Vorworte
4 Uni Wien
5 TU Wien
6 BOKU

7 Die VSC Systeme im Überblick

9 Projekte am Vienna Scientific Cluster

9 Biowissenschaften
Komplexe Systeme in lebenden Organismen
Genomische Selektion beim Rind über Rassen hinweg
Anwendung eines ultra-skalierbaren impliziten Finite Elemente Codes zur Bestimmung der mechanischen Eigenschaften von menschlichem trabekulären Knochen
Algorithmen zur Bestimmung evolutionärer Parameter
Wechselwirkung von Licht mit komplexen molekularen Systemen
Computergestützte Photochemie und Photobiologie
Analyse von Genkopplungen
Wann Vielfalt Vorteile bringt – Mathematische Modelle zur Evolution von genetischer Diversität unter fluktuierender Selektion

14 Umwelt, Energie und Klima
Partikel in Kontakt (PiKo)
Werkzeuge für Modelle einer nachhaltigen Raumnutzung
HiRmod
flexRISK
Fließgewässermodellierung
Modellierung biogeochemischer Grenzflächen in Böden
Prior-Bibliothek für Strukturmaterialien für die Kerndatenevaluation
ECOCHANGE
High performance solar cells (HiPerSol)
Lösung dynamischer Touren- und ressourcenbeschränkter Projektplanungsprobleme
MetGIS
PMinter

21 Gesundheit
Arzneimitteltransport
Anwendung von Molekulardynamiksimulationen für die Studie von membranständigen Transportproteinen
Mathematische Modelle für und Charakterisierung von BioFETs
Dissoziation von hERG Kanalinhibitoren

24 Astronomie/Astrophysik
Numerische Simulationen von Sternen der mittleren Hauptreihe
FLASH
Mehrdimensionale Modelle von Cepheiden
Dynamik solarer Granulation
Numerische Modellierung der Semikonvektion
Die „life supporting zone“: Wolken und Strahlungstransfer in der Atmosphäre von (Exo)Planeten
Zwerggalaxien
Kollisionen Schwarzer Löcher
Chemodynamical Evolution of Dwarf Spheroidal Galaxies

30 Grundlagenforschung
Bose-Einstein-Kondensate
Ladungs-Transfer Dynamik von Ion-Oberflächen Streuprozessen
Quantenchemische und quantendynamische Berechnung von kleinen organischen Molekülen in Laserfeldern
Quantenchromodynamik
Das Quark-Gluon-Plasma – Berechnungen zu Experimenten am CERN
Wechselwirkung Laser – Materie
Die perfekte Welle
Modellierung photo-induzierter Phänomene
Jupiters „Trojaner“ im Atom-Format
Wechselwirkung von ultrakurzen Pulsen mit Materie
TRESPASS Projekt
Mikro-Laser
Elektronen in Festkörpern
Stark korrelierte Quanten-Vielteilchensysteme im Nichtgleichgewicht
Die Suche nach exakten Korrelationen in Festkörpern
Elektrochemischer Ladungstransport
Frustrierte Magnete
Nichtlineare Schrödingergleichungen

40 Materialwissenschaften
Katalyse mittels Gold Nano-Partikeln auf dem Rh-BN Nanomesh
Großes Staunen über kleine Kristalle
Das Elektron ist ein Rudeltier
Ab initio Simulationen von Leerstellen-Fremdatom-Clustern in Al-Mg-Si Legierungen
Interstitielle Diffusion mit Trapping-Effekt
Atomistische Beschreibung des Keimbildungsprozesses in Legierungen
Projekt Spingraph
Projekt FOXSI
Wasser in Nanoporen
Kristallisation von unterkühlten Flüssigkeiten
Entwicklung selbstorganisierender Materialien
Das ATHENA Projekt – Außergewöhnlich starker Magnetismus in $RTcO_3$ Perovskiten
Entdeckung neuartiger topologischer Isolatoren
Das Lutetium-Wasserstoff-System
Ab initio und Dichtefunktionalrechnungen an „blue-shifting“ Wasserstoffbrücken
Ab initio Beschreibung von Nanostrukturen
Methoden für „Embedded Clusters” und nichtadiabatische Prozesse in Physik und Chemie
Materialwissenschaften und Schrödingergleichung: Löslichkeit von Kupfer in Eisen
Eigenschaften von sternförmig verknüpften (Co)polymeren
Übergangsmetall-Oxide: Atomgruppen und Einschlußverbindungen in Zeolithen

51 Ingenieurwissenschaften
Entwicklung eines Strömungssimulations-Codes zur Vorhersage der thermischen Belastung von Strukturen unter Feuerlast
Efficient Dry and Burn
New challenges for reducing agents in smelting reduction process
Projekt FATAL
Simulation magnetischer Speichermedien
Tribologie

55 Impressum

Wissenschaft und Hochleistungsrechnen

Seit dem Beginn der Entwicklung moderner wissenschaftlicher Methoden vor etwa 4 Jahrhunderten werden Hypothesen, meist in mathematischer Form, entwickelt und deren Vorhersagen experimentell überprüft. Diesem Wechselspiel von Theorie und Experiment verdanken wir die allermeisten Erkenntnisse der modernen Wissenschaft.

Viele Situationen oder Systeme sind allerdings so komplex, dass wir mit mathematischen Methoden, also mit Bleistift und Papier, nicht in der Lage sind, aus bekannten Theorien experimentell überprüfbare oder für die Praxis relevante Voraussagen abzuleiten. Die erforderlichen Rechnungen sind einfach zu aufwendig. Als Beispiel mögen hier die Eigenschaften von Materialien dienen, die durch die quantenmechanischen Wechselwirkungen einer sehr großen Zahl von Atomen, aus denen das Material besteht, bestimmt sind.

Schon in der Frühzeit der Entwicklung von Computern, also etwa ab 1950, wurden derartige Maschinen auch für komplexe wissenschaftliche Rechnungen eingesetzt. Auf diese Weise gelang es, auf Basis der bekannten wissenschaftlichen Theorien zunehmend komplexe Modelle der Wirklichkeit zu erstellen und damit auch für komplexe Systeme überprüfbare Vorhersagen zu treffen. Inzwischen hat sich diese Methodik (Computational Science) neben Theorie und Experiment zu einer dritten, gleichberechtigten Säule der Wissenschaft entwickelt. Heute können in vielen Fällen sogar Experimente durch numerische Rechnungen am Computer ersetzt werden. Ausgehend von der Physik verbreiten sich numerische Methodik und damit auch die oben beschriebenen wissenschaftlichen Methoden in andere Wissenschaftsgebiete.

Gerade die Wiener Universitäten haben hier eine lange Tradition, insbesondere im Bereich der Berechnung von Festkörpereigenschaften mit numerischen Methoden. Um diese Forschungsaktivitäten auf einem modernen und international konkurrenzfähigen Niveau durchführen zu können, werden naturgemäß konkurrenzfähige Rechnersysteme benötigt.

Mit Hilfe des Projektes VSC (Vienna Scientific Cluster), eines Gemeinschaftsprojektes von drei Wiener Universitäten mit finanzieller Unterstützung durch das Bundesministerium für Wissenschaft und Forschung, ist es gelungen, entsprechende Rechenleistung im Wiener Raum bereitzustellen.

Die vorliegende Broschüre solle einen Eindruck von den vielfältigen Projekten und deren Ergebnissen von wissenschaftlicher und praktischer Relevanz, die in etwas mehr als 2 Jahren auf den beiden Systemen VSC-1 und VSC-2 bearbeitet wurden, vermitteln.



Kooperation stärkt – Vienna Scientific Cluster stärkt Wissenschaftsstandort



O.Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.
Heinz W. Engl
Rektor der Universität Wien

Der Supercomputer, der im Herbst 2009 von der Universität Wien, der Technischen Universität und der Universität für Bodenkultur in Betrieb genommen wurde, ist, auch durch die VSC-2–Erweiterung, der schnellste Rechner Österreichs. Bei den Wissenschaftern der drei beteiligen Universitäten ist die enorme Rechen-Power sehr gefragt: Der VSC ist seit seinem Start voll ausgelastet.

Um im Bereich des Supercomputing auf wissenschaftlicher Ebene wettbewerbsfähig zu bleiben und Wissenschaftern der Universität Wien weiterhin dazu notwendige Rechnerkapazitäten zur Verfügung stellen zu können, werden hier in regelmäßigen Abständen Nachinvestitionen notwendig sein.

Österreichs Wissenschaft braucht Supercomputer. Computersimulationen haben sich in vielen wissenschaftlichen Bereichen als unverzichtbares Forschungsinstrument etabliert. Sie stellen ein drittes, komplementäres Standbein neben den traditionellen theoretisch-analytischen und den experimentellen Methoden dar.

Der **Vienna Scientific Cluster stärkt die Universität Wien** in ihrer wissenschaftlichen Leistung und den Wissenschaftsstandort insgesamt. Der VSC kommt in zahlreichen naturwissenschaftlichen Fächern, wie Physik, Chemie und Astronomie zum Einsatz. Stark genutzt wird der Cluster auch von der Mathematik.

Durch die Zusammenarbeit dokumentieren die drei beteiligen Universitäten, dass die Institutionen bereit sind im Sinne der Wissenschaft und Forschung kooperativ an einem Strang zu ziehen. Der Erfolg des Projekts zeigt, dass die Kooperationen von Universitäten gerade im Infrastrukturbereich zu Fortschritten führt, die eine Universität alleine nicht erreichen könnte.

Dieser **Weg der Kooperation wird weitergegangen werden!**



Weltklasseforschung durch Zusammenarbeit



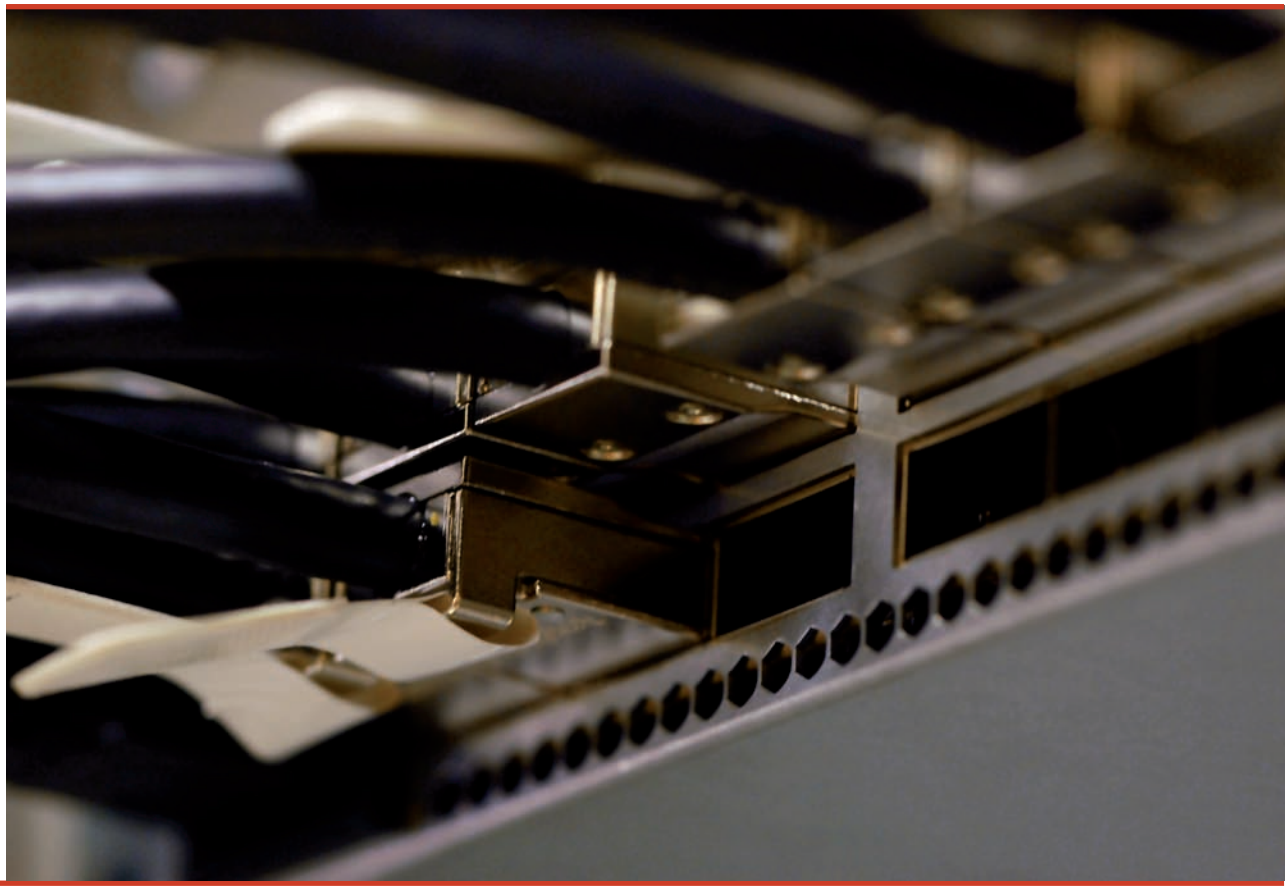
O.Univ.Prof. Dipl.-Ing.
Dr.techn. Sabine Seidler
Rektorin der Technischen
Universität Wien

Computersimulationen sind in der Wissenschaft unverzichtbar. Vom Verhalten des Universums kurz nach dem Urknall bis zur Entwicklung moderner Werkstoffe für die Industrie von morgen – aus vielen aktuellen Forschungsgebieten sind großangelegte Computerberechnungen heute nicht mehr wegzudenken.

Wer Weltklasseforschung betreiben will, braucht dazu auch Ausstattung auf Weltklasseniveau. Die Anschaffung eines Großrechners, der zu den leistungsfähigsten der Welt zählt, ist daher eine wichtige Investition in die Qualität unserer wissenschaftlichen Forschung. Dieser Schritt wurde nur dadurch möglich, dass gleich drei Wiener Universitäten ihre Kräfte bündelten: Der Großrechner VSC („Vienna Scientific Cluster“) wird von der Universität Wien, der Universität für Bodenkultur und der Technischen Universität Wien finanziert. Der VSC ist ein leuchtendes Beispiel dafür, dass alle Beteiligten nur profitieren können, wenn Universitäten bei wichtigen Projekten an einem Strang ziehen.

Schon bei der Umsetzung der ersten Ausbaustufe (VSC-1) zeigte sich, dass die Zusammenarbeit zwischen den Universitäten hervorragend funktioniert und dass durch die großen Rechenkapazitäten außergewöhnliche, international beachtete Forschungsergebnisse möglich werden. Die Umsetzung der zweiten Ausbaustufe VSC-2 war somit der nächste logische Schritt – denn an der Spitze bleibt man nur durch stetige Verbesserung.

Stolz sind wir nicht nur auf die außerordentliche Rechenleistung des VSC-2, sondern auch darauf, dass es sich um einen besonders umweltschonenden Computercluster handelt. Durch die Auswahl energiesparender Prozessoren und die Installation eines sehr effizienten Kühlsystems kann sich nicht nur die CO_2-Bilanz des Rechners sehen lassen, zusätzlich wird durch einen geringeren Stromverbrauch Geld gespart. Ökonomisches und ökologisches Denken gehören bei uns zusammen.



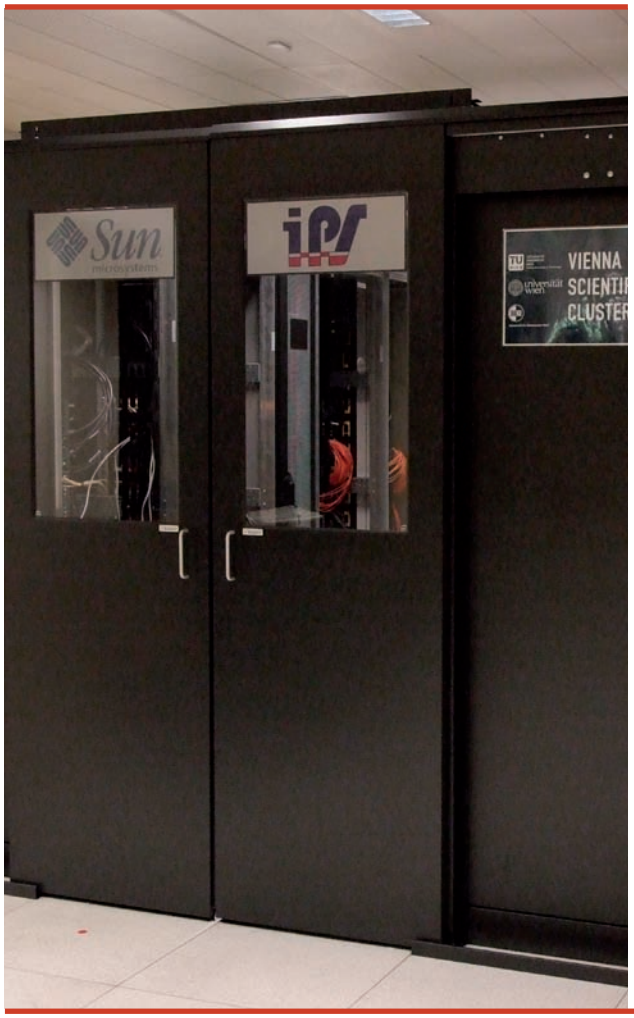
Die BOKU als Partner im VSC



Univ. Prof. DI Dr. DDDr.h.c.
Martin H. Gerzabek
Rektor der Universität
für Bodenkultur Wien

Die Universität für Bodenkultur Wien – vor 140 Jahren als Agrarhochschule gegründet – hat sich zu einer modernen Universität des Lebens entwickelt. Heute ist die BOKU im Bereich der Lebenswissenschaften die Leituniversität im Donauraum und gehört zu den führenden Life Science Universitäten in Europa.

Die drei Kompetenzfelder der BOKU sind (1) die Bewahrung von Lebensraum und Lebensqualität, (2) das Management natürlicher Ressourcen und Umwelt und (3) die Sicherung von Ernährung und Gesundheit. Sie steht damit für die Erforschung wissenschaftlicher Grundlagen in essentiellen Zukunftsthemen unserer Umwelt und Gesellschaft und adressiert die großen Herausforderungen für die Zukunft der Menschheit.



Hier bietet sich uns ein breites und attraktives Feld in Lehre und Forschung. Um unseren Beitrag leisten zu können und in Zukunft Entwicklungspotenziale auch nützen zu können, sind entsprechende Rahmenbedingungen erforderlich. Neben modernen und gut ausgestatteten Forschungslabors und Großversuchseinrichtungen ist gerade auch in den letzten Jahren im Life Sciences Bereich der Zugang zu Höchstleistungsrechnern notwendig geworden.

Von Beginn an hat daher die BOKU die Errichtung eines Vienna Scientific Clusters (VSC) mit großem Engagement unterstützt. Dank der wegweisenden Kooperation von Universität Wien, Technischer Universität Wien und BOKU und Unterstützung des Bundesministeriums für Wissenschaft und Forschung konnte erstmals am Standort Wien ein Supercomputer Center errichtet werden, welches auch international in seinen Rechenleistungen konkurrenzfähig ist.

BOKU Wissenschafter waren von Beginn an bei der Nutzung dieser großen Computerinfrastruktur dabei. Die Beispiele in dieser Broschüre überzeugen von dem vielfachen Einsatz und der Notwendigkeit des VSC: Von Modellierungen kleinster Interaktionen auf atomarer Ebene – zu Proteinmodellierungen – zu verfahrenstechnischen Simulationen – bis hin zum Rechnen ganzer Klimaszenarien.

Die derzeit stattfindende technische Revolution im Bereich der Gensequenzierung lässt erwarten, dass die Bedeutung der Hochleistungsrechner in diesem Feld weiter zunehmen wird. So können ganze Genome innerhalb kürzester Zeit gelesen werden. Unglaublich große Datenmengen werden dabei generiert. Der Einsatz von Supercomputern wird in der Bioinformatik und Biotechnologie in Zukunft eine fixe Größe darstellen. Die Erweiterung des VSC um eine weitere Maschine (VSC-3) ist daher auch für uns ein wichtiger und notwendiger Schritt. Die VSC Partnerschaft der Universität Wien, der TU Wien und BOKU hat für alle drei Universitäten etwas ermöglicht, was den Wissenschaftsstandort Wien langfristig stärken wird.

Die VSC Systeme im Überblick

Der erste Cluster – VSC-1

Technische Daten

Beim Vienna Scientific Cluster (VSC-1) handelt es sich um ein System von Sun Microsystems, welches von der Wiener Firma IPS angeboten wurde. Das im Jahr 2009 installierte System besteht aus 436 Rechenknoten mit je zwei Intel X5550 Nehalem Prozessoren mit 2,66 GHz, je 24 GByte 1,33 GHz DDR3 RAM als Hauptspeicher und je einer 500 GByte SATA Platte. Die Kopplung erfolgt über InfiniBand mit gemischter DDR und QDR (40 Gbit/s full duplex, netto 32 GBit/s) Geschwindigkeit. Ein zusätzliches GBit-Ethernet Netzwerk ermöglicht den Zugriff auf die Fileserver. Jede der beteiligten Universitäten hat einen eigenen Zugangsknoten mit einer eigenen Domain. Mehrere Master-Server sorgen für die Verteilung der Rechenaufgaben und das System-Management. Alle Knoten und Netzwerk-Komponenten wurden in 14 konventionelle 19-Zoll Rack-Schränke eingebaut. Im Zuge einer Erweiterung im Jahr 2010 konnten 40 Rechenknoten der Firma Supermicro, von denen jeder mit zwei Intel Westmere CPUs mit je sechs Kernen und einer Taktfrequenz von 2,66 GHz ausgestattet ist, zum bestehenden System hinzugefügt werden. Wie bei den Systemen von Sun Microsystems wurden 24 GByte Speicher pro Knoten verbaut. Installiert wurde das komplette System im Rechenraum im 2. Stock des Freihaus-Gebäudes der TU Wien.

Am VSC-1 stehen somit 3968 Rechenkerne und über 34.000.000 Core-h Rechenzeit jährlich zur Verfügung und die Applikationen der Benutzer können auf 11,2 TiB (=10,2 TB) Hauptspeicher zurückgreifen. Unter Volllast hat das gesamte System (Knoten, Fileserver, Zugangsrechner, Netzwerk, Kühlung) eine Anschlussleistung von ca. 180 kW. Die Knoten und Netzwerkkomponenten sind luftgekühlt und blasen die warme Abluft in einen geschlossenen Gang, aus dem sie von Kühlgeräten (sog. CoolLoops der Firma Knürr) abgesaugt und wieder auf Raumtemperatur gekühlt wird (Warmgangeinhausung).

Internationaler Vergleich

Die theoretische Spitzenleistung des Systems betrug bei seiner Installation R_{peak}=39,2 TFlops, die tatsächliche Leistung, R_{max}, lag bei 35,5 TFlops. Diese Leistung wurde mit dem High-Performance LINPACK-Benchmark ermittelt und entspricht einer Effizienz von 91,3%. In der Top500-Liste der weltweit leistungsfähigsten Supercomputer schien der VSC-1 im November 2009 mit diesem Wert auf Rang 156 auf (www.top500.org). Einen Vergleich für die Energieeffizienz von Hochleistungsrechnern liefert die Green500 Liste (www.green500.org). Dort befand sich der VSC-1 bei Betriebsbeginn mit einer Leistungeffizienz von 199.33 MFlops pro Watt auf Platz 94.

Die Einheit Flops bedeutet
Floating Point Operations per Second –
Gleitkommaoperationen pro Sekunde
die Größenordnungen sind:
1 GFlops=1.000.000.000 Flops
1 TFlops=1.000.000.000.000 Flops
1 PFlops=1.000.000.000.000.000 Flops

Das Nachfolge-System – VSC-2

Die Kooperation der drei Universitäten hat sich bewährt: Schon das Vorgängermodell, der VSC-1, war Österreichs leistungsfähigster Computer und ermöglichte Forschungsgruppen der Technischen Universität Wien, der Universität Wien und der Universität für Bodenkultur beachtliche wissenschaftliche Erfolge. Seit Oktober 2011 ist der Vienna Scientific Cluster 2 (VSC-2) in Betrieb, der seinen Vorgänger an Leistung noch einmal um etwa das Vierfache übertreffen wird. Offiziell eröffnet wurde der VSC-2 am 21. Juni von Bundesminister für Wissenschaft und Forschung Karlheinz Töchterle und drei Vizerektoren der beteiligten Universitäten.

International ganz vorne mit dabei

Von der Materialwissenschaft bis zur Meteorologie – das Einsatzgebiet des neuen österreichischen Spitzencomputers ist vielfältig. Rektorin Sabine Seidler (TU Wien) setzt hohe Erwartungen in den VSC-2: „Schon bisher waren leistungsfähige Großrechner ein unverzichtbares Werkzeug für unsere Forschung. Mit dem VSC-2 sind wir weiterhin international ganz vorne mit dabei und werden auch in Zukunft vielbeachtete Forschungsergebnisse erzielen.“ Laut Rektor Heinz W. Engl (Universität Wien) zeigt der Erfolg des Projekts, dass die Kooperationen von Universitäten gerade im Infrastrukturbereich zu Fortschritten führt, die eine Universität alleine nicht erreichen kann: „Dieser Weg der Kooperation soll weitergegangen werden“.
Bundesminister Töchterle betont, dass die Investition von Uni Wien, TU Wien und BOKU die Vorteile eines gemeinsamen Vorgehens zeige und zudem ein starkes Signal seitens der Universitäten sei, im Sinne der Wissenschaft und Forschung kooperativ an einem Strang zu ziehen. „Das Projekt ist damit auch ein gelebtes Beispiel für die Philosophie des Hochschulplans, der Universitäten zur Kooperation anregt und bei der Umsetzung zugleich großen individuellen Gestaltungsraum zulässt“, so Töchterle. Für den Bundesminister hat die Investition auch hohe Symbolkraft: „Diese ist nicht zuletzt auch Ausdruck meiner Vorstellung von gelebter Autonomie: Freiheit dazu nützen, um sich selbst zu entfalten und neue gemeinsame Potenziale zu aktivieren!“



Platz 56 in der Weltrangliste

Bereits in den ersten Tests wurde der neue Rechner bis an seine Grenzen ausgelastet – und mit dem Ergebnis konnte man mehr als zufrieden sein: Der VSC-2 brachte es dabei auf auf 135,6 TFlops und schaffte damit den bemerkenswerten 56. Platz auf der im Juni 2011 veröffentlichten Top500-Liste. Im Verlauf der Testphase im Herbst desselben Jahres konnte diese Leistung noch weiter auf 152,9 TFlops gesteigert werden. Die gewaltige Rechenleistung kommt nicht durch spezielle Prozessoren zustande – die sind durchaus mit den Prozessoren vergleichbar, die man zuhause im PC findet. Das Erfolgsgeheimnis liegt in der enormen Anzahl von 21216 parallel arbeitenden Prozessorkernen und ihrem effizienten Zusammenwirken. Die Anschaffungskosten von etwa 4,2 Millionen Euro teilten sich die Universität Wien und die TU Wien je zur Hälfte, die BOKU beteiligt sich an den Personalkosten.

Grüne Spitzentechnologie

Neben der Rechenleistung war die Umweltbilanz bei der Wahl des Gerätes ausschlaggebend: Durch energiesparende Prozessoren und ein effizientes Kühlsystem am Standort der TU Wien im Arsenal ist die Energieeffizienz (die Rechenleistung pro aufgewendeter Energie) des VSC-2 etwa doppelt so hoch wie jene des Vorgängermodells. „Der neue VSC-2 arbeitet in wassergekühlten Schränken mit einer Vorlauftemperatur von 18 Grad, anstatt mit sechs Grad kaltem Wasser, wie es bei älteren Systemen üblich war. Damit sind die anfallenden Energiekosten zur Kühlung des Systems deutlich geringer“, so Prof. Herbert Störi (TU Wien), wissenschaftlicher Leiter des Projekts.

Technische Details

Die drei Universitäten entschieden sich für das Angebot der Firma MEGWARE Computer aus Chemnitz, Deutschland. Das System besteht aus 1326 Rechnerknoten, jeder Knoten verfügt über zwei Prozessoren vom Typ AMD Opteron 6132 HE mit 2,2 GHz Taktrate und je acht Prozessorkernen. Die Knoten sind mit einem schnellen InfiniBand-Netzwerk mit einem Datendurchsatz von 32 Gigabit pro Sekunde verbunden. Der VSC-1 wird unabhängig von der Anschaffung des VSC-2 weiter betrieben.

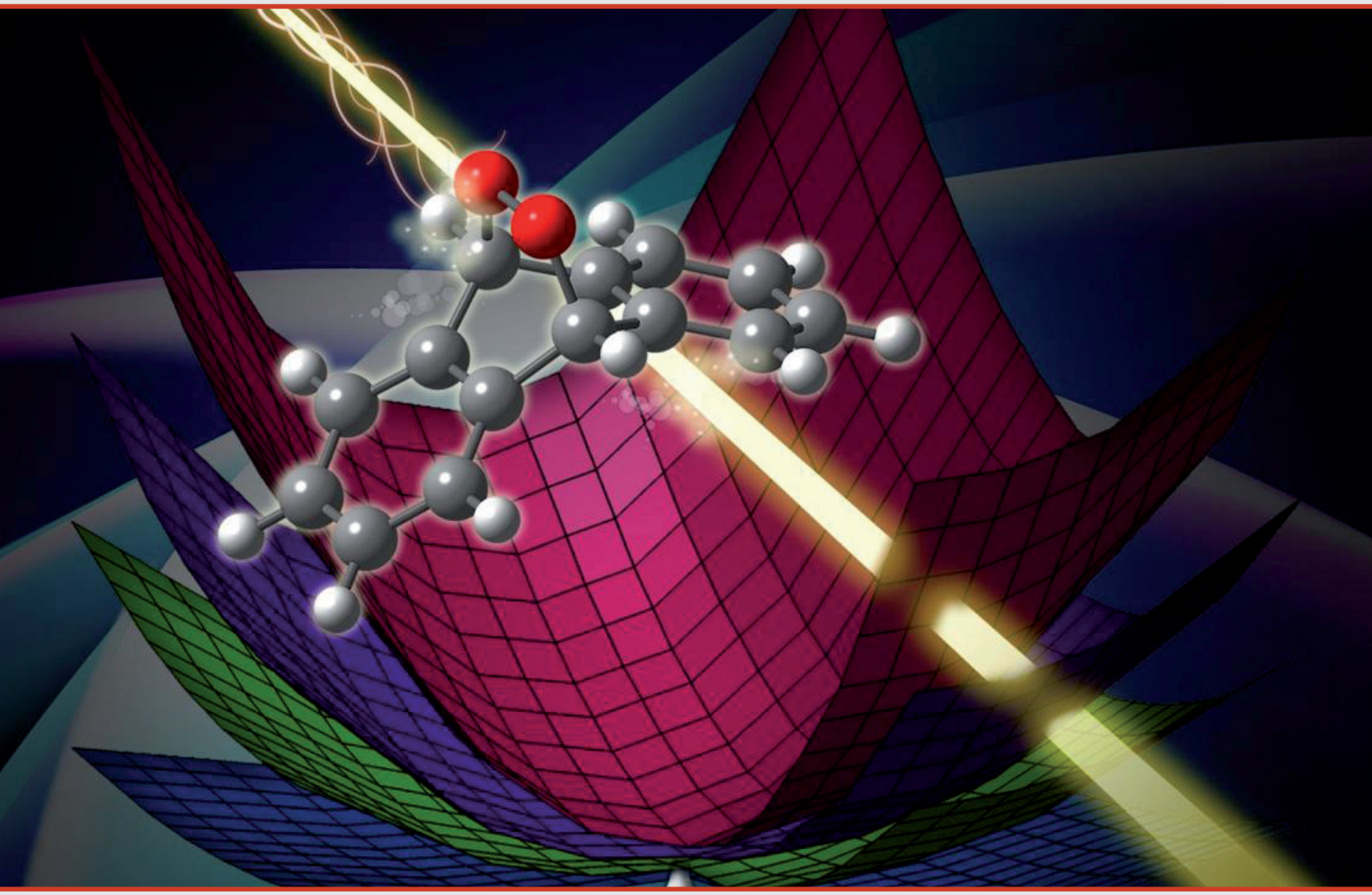
Zugang zum Vienna Scientific Cluster

Hinter jedem am VSC durchgeführten Projekt soll ein wissenschaftliches Projekt stehen, das an einer der drei beteiligten Universitäten (Uni Wien, BOKU, TU Wien) durchgeführt wird. Jedes Projekt muss ein internationales Peer Review (Begutachtungs-) Verfahren durchlaufen haben. Nachdem ein Antrag durch eine(n) Projektleiter(in) eingebracht wurde, wird zunächst die technische Realisierbarkeit und die Durchführbarkeit unter Berücksichtigung der geforderten Ressourcen geprüft. Testprojekte werden dann in der Regel sofort freigegeben, während die anderen Projektarten noch vom Steering Committee geprüft werden. Sobald das Steering Committee ein Projekt freigegeben hat, können vom Projektleiter Benutzer angelegt werden, welche sich am Zugangsknoten ihrer Universität einloggen können.

Das Steering Committee setzt sich zusammen aus den Vizerektoren für Forschung, den Leitern der der Zentralen Informatikdienste und Vertretern der Nutzer.

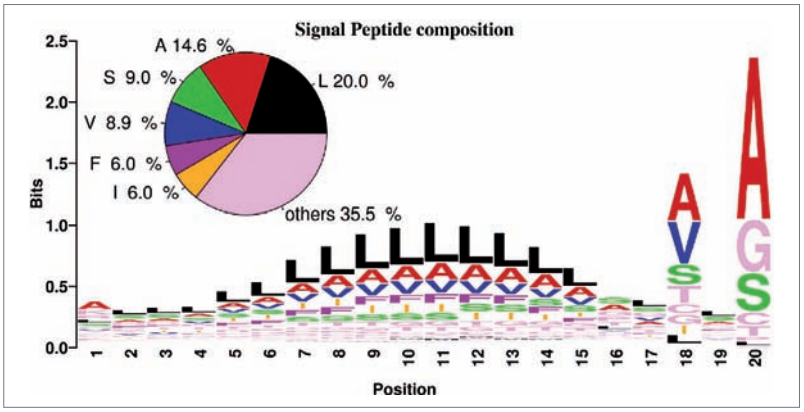
Projekte am Vienna Scientific Cluster

Biowissenschaften



Komplexe Systeme in lebenden Organismen

Die Bioinformatik Gruppe an der Universität für Bodenkultur setzt zwei Schwerpunkte in der Verfolgung eines zentralen Ziels, der Erforschung komplexer Systeme in lebenden Organismen. Die in höheren Lebewesen typischen Redundanzen und vielfachen Wechselwirkungen erfordern hier neue Sichtweisen in Ergänzung klassischer Gen-für-Gen Ansätze. Dazu verbinden wir die Etablierung und Verbesserung quantitativer experimenteller Messmethoden mit der Entwicklung moderner computergestützter Methoden. Bei der Auswertung der großen genomweiten Datenmengen kommt auch der Vienna Scientific Cluster zum Einsatz. In einer systematischen Studie von Ein-Aminosäure-Mustern in so genannten Signalpeptiden, welche den Transport von Proteinen aus der Zelle steuern, konnte so kürzlich ein unerwartetes in Säugetieren konserviertes Motiv gefunden werden. Die Abbildung zeigt, dass im Zentrum von Signalpeptiden verschiedene wasserabstoßende Aminosäuren dominant sind. Dennoch sind nur Leucin-Wiederholungen in den Signalpeptiden von Säugetieren angereichert und konserviert. Es wird eine zweite Signalwirkung vermutet.



David Philip Kreil
Vienna Science Chair of Bioinformatics
Universität für Bodenkultur Wien

Genomische Selektion beim Rind über Rassen hinweg

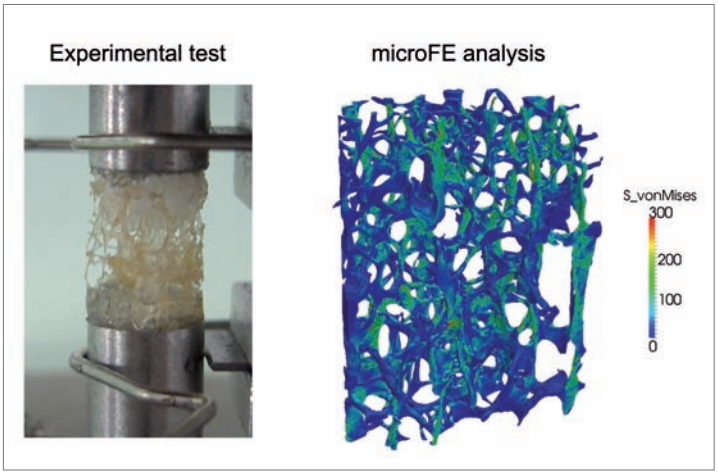
In diesem Projekt wird untersucht, ob mit Hilfe eines sog. high density chips mit 600.000 Markern die Leistungsinformationen verschiedener Rassen gemeinsam genutzt werden können. Es werden gezielt Regionen des Genoms gesucht und charakterisiert, die über Rassen hinweg einen Effekt auf Zuchtwerte bei Fleckvieh, Braunvieh, Pinzgauer und Tiroler Grauvieh haben. Die potentielle Effizienz der Methoden wird mittels der Korrelationen zwischen geschätzten genomischen Zuchtwerten und Zuchtwerten basierend auf Nachkommenleistungen für Stiere, deren Daten bei der Entwicklung der Schätzformel nicht involviert waren, überprüft. Die Methoden der genomischen Zuchtwertschätzung werden für alle Merkmale der konventionellen Zuchtwertschätzung entwickelt.



Gabor Meszaros, Patrik Waldmann
Nutztierwissenschaften (NUWI)
Universität für Bodenkultur Wien

Anwendung eines ultra-skalierbaren impliziten Finite Elemente Codes zur Bestimmung der mechanischen Eigenschaften von menschlichem trabekulären Knochen

Trabekulärer Knochen ist ein irreguläres, dreidimensionales Netzwerk, bestehend aus Balken und Platten aus mineralisiertem Gewebe, welches maßgebend zur Stabilität des menschlichen Skeletts beiträgt. Die digitale Finite Elemente (FE) Methode kann zur Berechnung der mechanischen Eigenschaften dieses Knochengewebes verwendet werden. Um die feine Mikrostruktur im Detail modellieren zu können, sind extrem große FE Modelle mit mehreren Millionen Elementen notwendig. Mit Hilfe eines am ILSB adaptierten, auf dem FEAP framework basierenden Codes können diese Knochen-Modelle am Vienna Scientific Cluster simuliert werden. Das Ziel dieses Projekts ist es, durch den Vergleich von experimentellen Tests und microFE Simulationen die mechanischen Eigenschaften von menschlichem trabekulären Knochen zu bestimmen.



Dieter Pahr, Thomas Gross
Institut für Leichtbau und Struktur-Biomechanik (ILSB)
Technische Universität Wien

Algorithmen zur Bestimmung evolutionärer Parameter

Durch neue Technologien konnten in den letzten Jahren immer größere Mengen an DNA-Daten sequenziert werden, die völlig neue Einsichten in viele Fragen der Evolutionsbiologie und Medizin ermöglichen. Gleichzeitig stellt die Analyse dieser Daten eine große Herausforderung dar: Viele bewährte statistische Methoden sind nicht für solch hochdimensionale Daten geeignet.

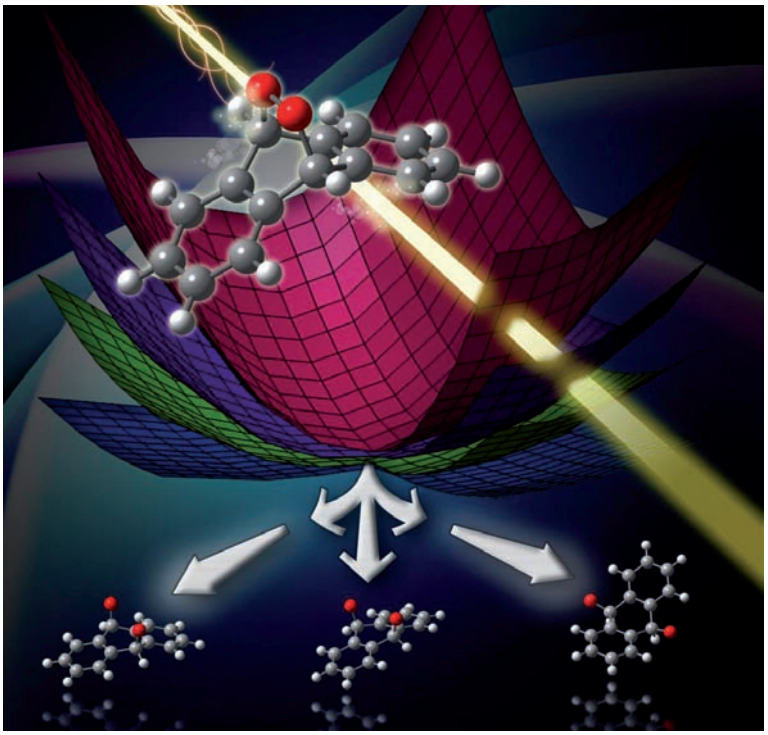
Wir entwickeln Algorithmen, um evolutionäre Parameter wie Migrationsraten und Selektionskoeffizienten zu schätzen. Das ermöglicht es uns, basierend auf DNA-Sequenzen von Individuen der letzten Generation, Aussagen über die evolutionäre Vergangenheit der Population zu treffen.



Johanna Bertl, Andreas Futschik
Institut für Statistik und Operations Research
Universität Wien

Wechselwirkung von Licht mit komplexen molekularen Systemen

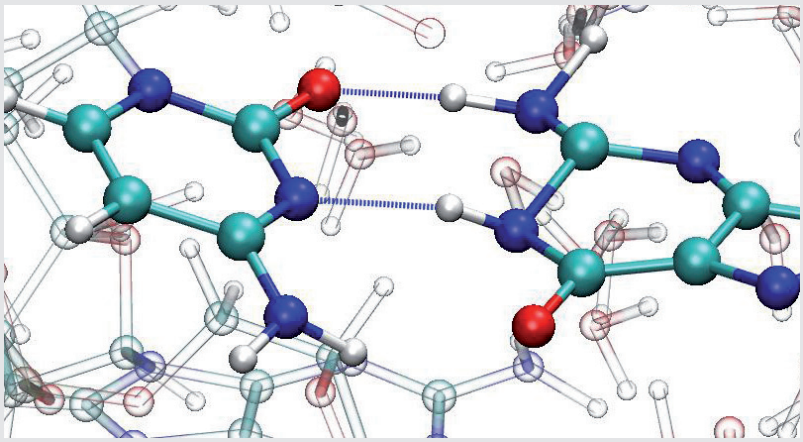
Im Mittelpunkt unserer Forschung steht das Verständnis der Wechselwirkung von Licht mit komplexen molekularen Systemen. Diese Phänomene bilden den Kern moderner Technologien, sowie biologischer und medizinischer Fragestellungen wie Photovoltaik, Sehprozess oder der Photodynamischen Therapie. Zu diesem Zweck kombinieren wir hoch genau quantenchemische Rechnungen mit einem generalisierten Ab inito Molekulardynamikcode um alle auftretenden photophysikalischen und photochemischen Prozesse beschreiben zu können. Mit Hilfe dieser Simulationen können wir zeitaufgelöste Ereignisse, welche auf einer Femtosekundenzeitskala stattfinden, sowohl erklären als auch vorhersagen.



Markus Oppel, Leticia Gonzalez
Institut für Theoretische Chemie
Universität Wien

Computergestützte Photochemie und Photobiologie

Photochemie und Photobiologie führen in hochinteressante Gebiete, welche faszinierende Aspekte und Fragen des Ursprungs des Lebens und anderer fundamentaler Prozesse in biologischen Systemen darstellen. Das gegenwärtige Projekt konzentriert sich auf die Simulation der Photostabilität der DNA und deren Nukleobasen in Vakuum und eingebettet in eine DNA Umgebung. Unter Verwendung von hoch entwickelten quantenchemischen (COLUMBUS) und „surface hopping“ (NEWTON-X) Programmsystemen, die in unserer Arbeitsgruppe erarbeitet wurden, konnten erstmals die photodynamischen Prozesse, die in Nukleobasen auftreten, berechnet und analysiert werden. Die Resultate dieser Untersuchungen wurden in hoch kompetitiven wissenschaftlichen Journalen publiziert.



In der Abbildung ist die Momentaufnahme einer photodynamischen Simulation eines Cytosin-Guanin Basenpaares eingebettet in DNA.

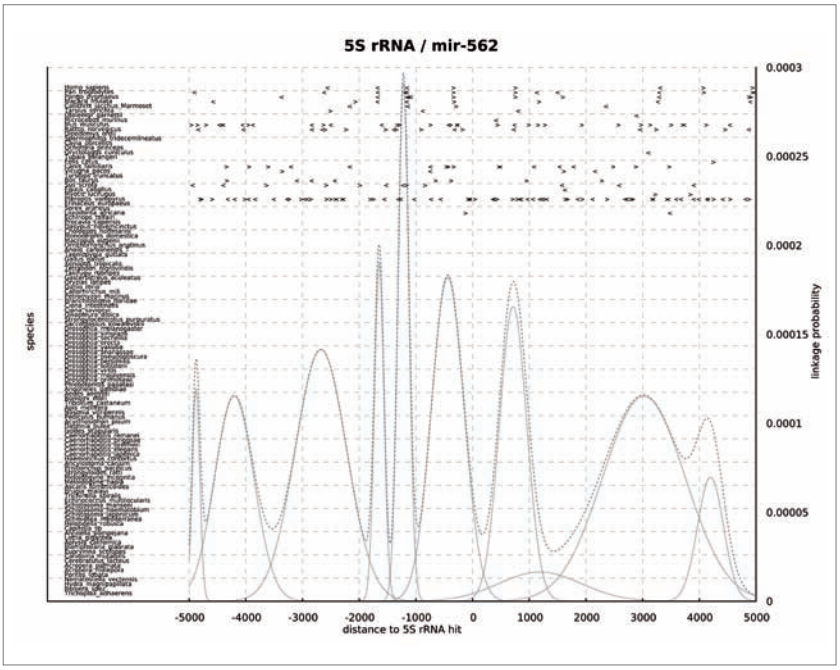
Hans Lischka
Institut für Theoretische Chemie
Universität Wien

Analyse von Genkopplungen

Die Genkopplungs-Analyse sucht nach Verbindungen in der Genposition je zweier Gene (entweder Proteine oder nicht-kodierende RNA). Dies führt oft zu unerwarteten evolutionären Verbindungen zwischen Genen, was bei der Erstellung von Spezies-Stammbäumen und der Suche neuer Gene hilft.

Das Bild bietet einen ersten statistischen Blick auf 5S rRNA (eine wichtige nicht-kodierende RNA) und einer microRNA in 120 Species (siehe „Vierna et al, Evolutionary analysis of 5S ribosomal DNA in metazoans“).

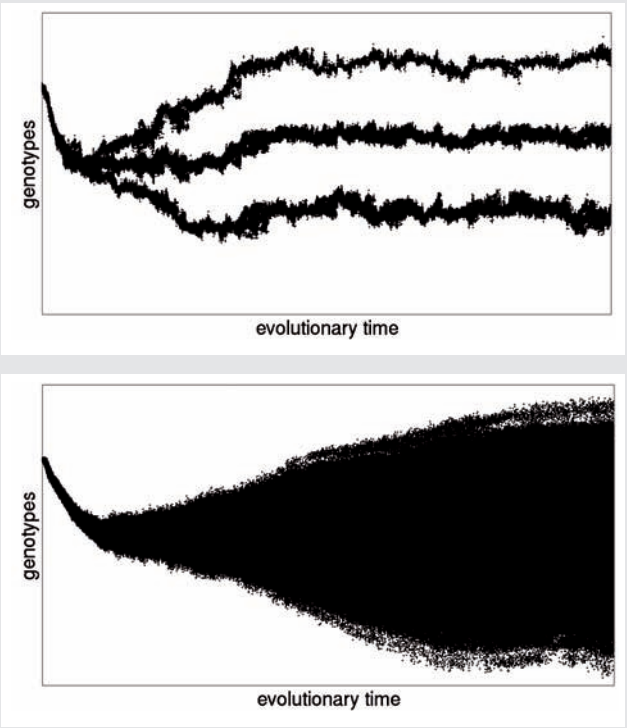
Eine vollständige Analyse aller bekannten und vorhergesagten Protein- und ncRNA Gene in über 100 Spezies und mehr als 15600 Gen-Familien ist momentan in Arbeit.



Christian Höner zu Siederdissen
Institut für Theoretische Chemie
Universität Wien

Wann Vielfalt Vorteile bringt – Mathematische Modelle zur Evolution von genetischer Diversität unter fluktuierender Selektion

Wir forschen unter welchen Bedingungen zeitliche und räumliche Schwankungen in Selektionsdrücken zur Evolution und zum Erhalt von genetischer Diversität beitragen können. Es zeigt sich, dass die Kombination von beiden Faktoren genetische Vielfalt stark fördert. Der VSC wurde genutzt, um unsere mathematische Theorie anhand von individuen-basierenden Simulationen zu prüfen und zu bestätigen. Die Abbildung zeigt zwei simulierte Evolutionsabläufe zu verschiedenen Parameterwerten. Evolutionäre Zeit läuft auf der Abszisse von links nach rechts, während die Ordinate die verschiedenen Genotypen in der Population darstellt.



Hannes Svardal, Claus Rüffler und Joachim Hermisson
Fakultät für Mathematik, Arbeitsgruppe Biowissenschaften
Universität Wien

Umwelt, Energie und Klima



Partikel in Kontakt (PiKo)

Adhäsionskräfte zwischen hydrophilen Nanopartikeln variieren stark in Abhängigkeit von der Menge des aus der Luft kondensierten Wasserdampfes. Wobei die Affinität Wasser zu adsorbieren von den Oberflächeneigenschaften der Partikel abhängt, dazu gehören Oberflächenrauigkeit sowie Art der Oberflächenadsorbate und chemischen Verunreinigungen. Flüssiges Wasser bildet Brücken in den Partikelzwischenräumen, die so genannte Kapillarkräfte verursachen. Diese können die Wechselwirkungen der trockenen hydrophilen Partikel um ein Vielfaches übersteigen. Kapillarkräfte fördern daher die Bildung von Partikelagglomeraten, die die Fließeigenschaften von trockenen Pulvern verschlechtern. Um den Einfluss von adsorbiertem Wasser auf die Partikelwechselwirkungen quantitativ zu beschreiben, ist es notwendig, Adhäsionskräfte für variierende relative Luftfeuchtigkeit mittels Molekulardynamiksimulationen zu untersuchen.

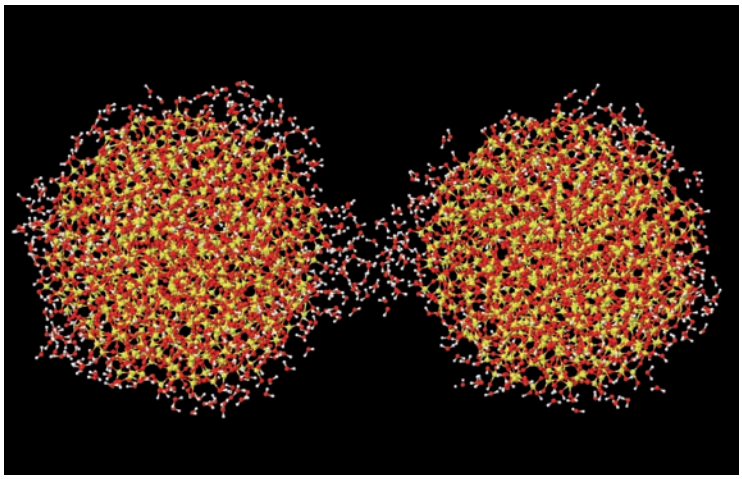
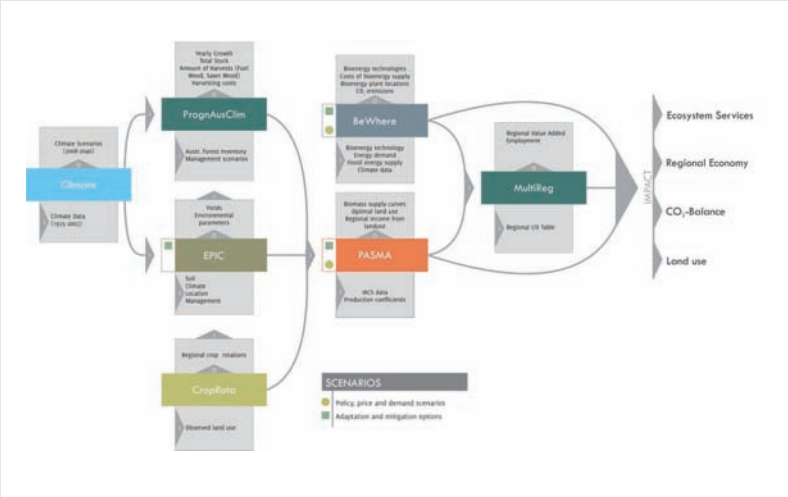


Abbildung: Sich formende Wasserbrücken zwischen feuchten Silikananopartikeln bei einen Schwerpunktsabstand von 5 nm.

Sabine Leroch
Verfahrens- und Energietechnik (IVET)
Universität für Bodenkultur Wien

Werkzeuge für Modelle einer nachhaltigen Raumnutzung

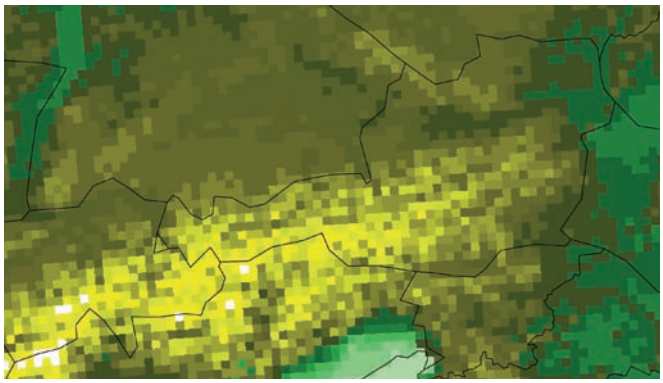
Im Rahmen dieses Projekts wird ein Integrated Assessment Framework entwickelt und zur Analyse der Minderung klimatischer Veränderungen und Anpassungsoptionen in der österreichischen Land- und Forstwirtschaft herangezogen. Es werden sowohl Synergien und Abwägungen zwischen alternativen Handlungsszenarien in beiden Sektoren bewertet, als auch deren Effekte auf regionale Ökonomien und Ökosysteme mit einer breiten Palette von Indikatoren beurteilt. Das Integrated Assessment Framework koppelt disziplinäre Daten und Modelle mit einer interdisziplinären Szenarien-Analyse, um besser auf das Feedback zwischen Ökosystemen und gesellschaftlichen Systemen sowie auf direkte und indirekte Effekte von Klima und Landnutzung auf regionaler und nationaler Ebene eingehen zu können.

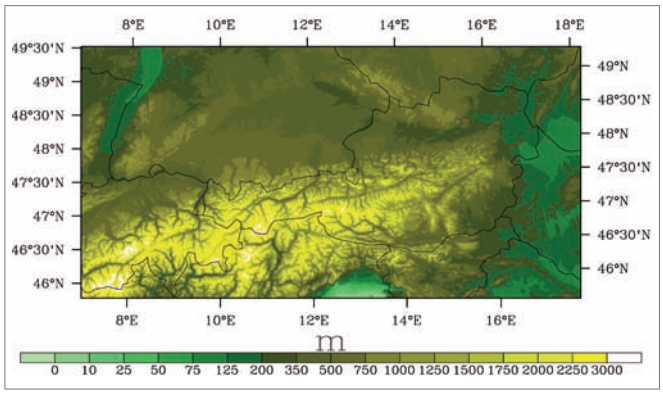


Martin Schönhart
Nachhaltige Wirtschaftsentwicklung
Universität für Bodenkultur Wien

HiRmod

Gegenwärtig arbeiten regionale Klimamodelle mit einer Auflösung von etwa 10 km Gitterlänge (Abbildung oben). Das Projekt HiRmod dient der Vorbereitung für den Zeitpunkt, zu dem es rechentechnisch möglich sein wird, solche Klimaszenarien mit 1 km Auflösung zu erstellen (Abbildung unten). Dies ist für Gebirgsregionen wie die Alpen sehr erstrebenswert. Dazu wurden die meteorologischen Simulationsmodelle MM5 und WRF am VSC-1 implementiert und die Landnutzungs- und Geländehöhendaten an die höhere Auflösung angepasst. Das 1 km Ziel dürfte noch in einiger Ferne liegen, wichtige Fragen konnten jedoch erklärt werden. So kommt der Reduktion und Beschleunigung des Outputs eine zentrale Bedeutung zu.
HiRmod wird vom Austrian Climate Research Programme des Klima- und Energiefonds gefördert.

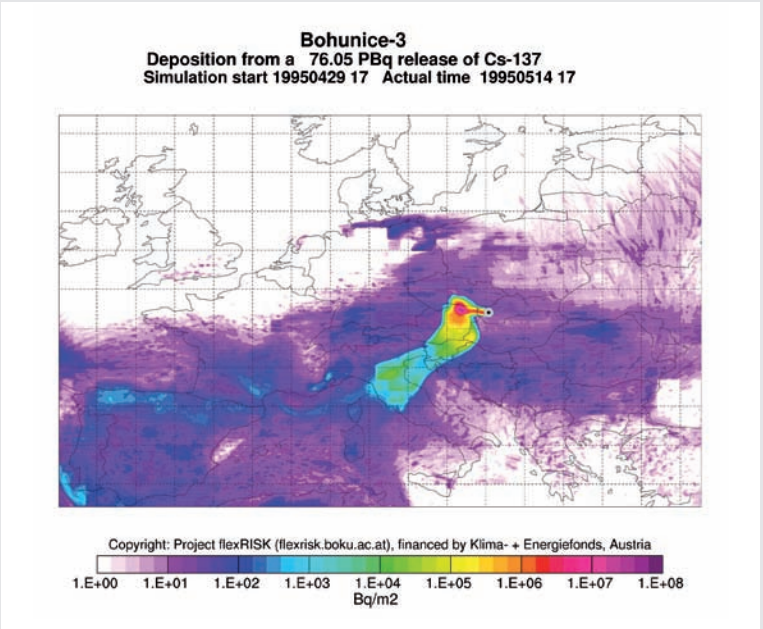




Irene Schicker, Delia Arnold, Petra Seibert
Meteorologie (BOKU-Met)
Universität für Bodenkultur Wien

flexRISK

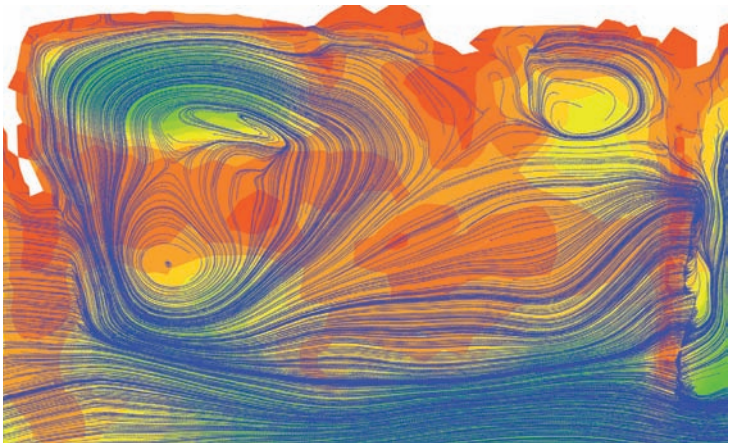
Das Projekt flexRISK (flexrisk.boku.ac.at) untersucht die geographische Verteilung des Risikos durch schwere Unfälle in Kernkraftwerken in Europa. Ausgehend von Freisetzungsszenarien und Unfallhäufigkeiten werden meteorologische Ausbreitungsrechnungen für über 2.700 Wettersituationen und daran anschließend Dosisberechnungen zur Abschätzung der Folgen durchgeführt. Die Abbildung zeigt die Bodenkontamination mit Cäsium-137 in einem solchen Fall, in dem Österreich bei einem schweren Unfall in Bohunice massiv betroffen wäre. Durch dieses Sichtbarmachen der Risiken der nuklearen Option und Vergleich der Risiken verschiedener KKWe nach Bauart und Lage können die Entscheidungsträger unterstützt und die interessierte Öffentlichkeit besser informiert werden.
flexRISK wird durch den Klima- und Energiefonds finanziert.



Irene Schicker, Delia Arnold, Petra Seibert
Meteorologie (BOKU-Met)
Universität für Bodenkultur Wien

Fließgewässermodellierung

Die Ziele des Projekts liegen in der Verbesserung des Verständnisses ablaufender Prozesse in Flüssen, der Entwicklung von mathematischen Modellen zur Prozessbeschreibung und Prognose der Auswirkungen von flussbaulichen Maßnahmen sowie der Entwicklung von innovativen wasserbaulichen Methoden zur Verbesserung der Schifffahrt, des Hochwasserschutzes und der Ökologie. Im Modul Fließgewässermodellierung werden mehrdimensionale mathematische Modelle zur Simulation der Hydrodynamik, des Sedimenttransportes, der Flussmorphologie sowie der ökologischen Prozesse konzipiert und softwaretechnisch entwickelt. Die Entwicklung und Umsetzung von innovativen wasserbaulichen Maßnahmen verbunden mit einem intensiven Monitoring basieren auf einem verbesserten Prozessverständnis und dienen sowohl der wirtschaftlichen Entwicklung entlang der Donau als internationale Wasserstraße, als auch der Ökologie.

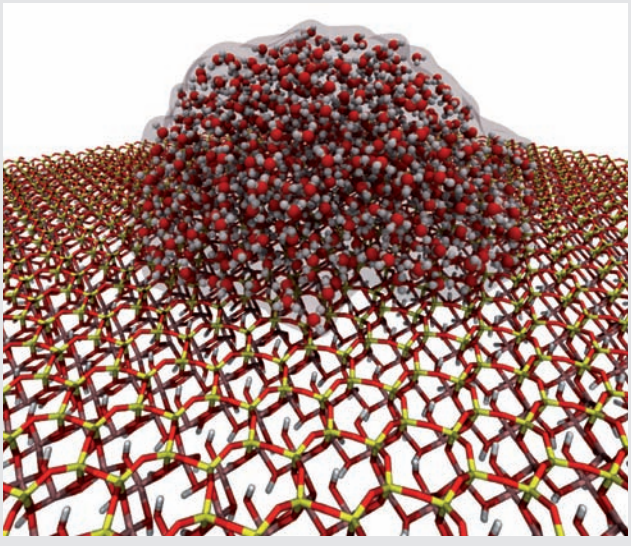


Die Grafik zeigt eine 3D-Modellierung von Partikelpfaden in einem Buhnenfeld der Donau.

Michael Tritthart
Wasserwirtschaft, Hydrologie und konstruktiver Wasserbau (IWHW)
Universität für Bodenkultur Wien

Modellierung biogeochemischer Grenzflächen in Böden

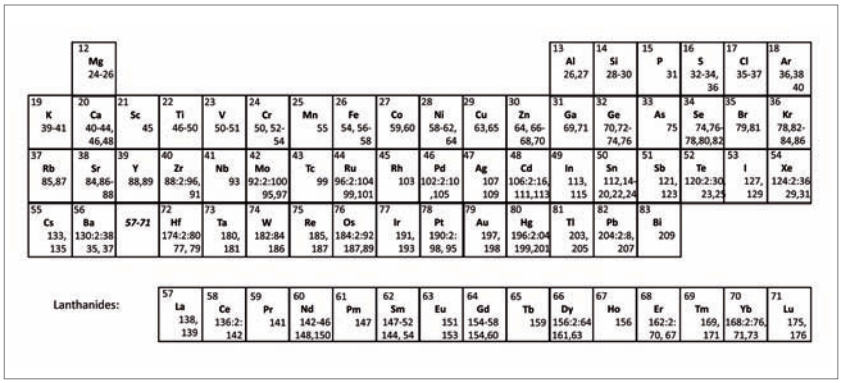
Das Projektziel ist die Bereitstellung von detaillierten Informationen über die Wechselwirkungen von umweltrelevanten Chemikalien (z.B. Pestizide, Polyzyklische Kohlenwasserstoffe) mit reaktiven Oberflächen von Bodenbestandteilen auf der molekularen Skala. Dazu werden vor allem molekulare Simulationsmethoden angewandt, die auf Quanten- und Molekularmechanik (Kraftfeldmethoden) in Kombination mit molekulardynamischen Methoden basieren. Dieser Ansatz erlaubt es, ein detailliertes Bild über die strukturellen, energetischen, dynamischen und spektroskopischen Eigenschaften der geochemischen Grenzflächen und deren Interaktionen zu erhalten. Das Projekt behandelt drei größere Themenbereiche: i) Bodenmineralien, Mineraloberflächen und organo-mineralische Komplexe; ii) Huminsäuren und deren Strukturen, Wechselwirkungen und Radikale; iii) Eigenschaften von pyrogenem Kohlenstoff (PK), Wechselwirkungen von Substanzen mit PK.



Daniel Tunega, Adélia J. A. Aquino, Hasan Pašalić, Roland Šolc, Martin H. Gerzabek und Hans Lischka
Bodenforschung (IBF)
Universität für Bodenkultur Wien

Prior-Bibliothek für Strukturmaterialien für die Kerndatenevaluation

In Kerndatenevaluationen wird Wissen von Kernmodellen und Experimenten kombiniert zu Datensätzen für nukleare Anwendungen wie z.B. Dosimetrie, medizinische Anwendungen. Die Entwicklung neuer Reaktortypen (z.B. Fusions-Reaktor) geht einher mit einer Erweiterung des Energiebereiches bis zu 150 MeV und der Forderung nach Kovarianz-Information. Da in diesem Energiebereich die Prior Information von großer Bedeutung für die Evaluation ist, wurde eine Prior-Bibliothek für 9 Reaktionskanäle bis 150 MeV für 276 Isotope von Strukturmaterialien mit Hilfe des VSC (300000 CPUh) erstellt. Diese Bibliothek stellt einen wohldefinierten Ausgangspunkt für zukünftige Evaluationen dar.



Die Abbildung zeigt gerechnete Isotope der Prior-Bibliothek für Strukturmaterialien. ‚162:2:70' bedeutet ‚162,164,166,168,170'.

Stefan Gundacker, Helmut Leeb, Denise Neudecker, Thomas Srdinko, Volker Wildpaner
Atominstitut
Technische Universität Wien

ECOCHANGE

Der Klimawandel wird die Areale von Gebirgspflanzen reduzieren, aber quantitative Abschätzungen des voraussichtlichen Arealverlusts beruhen bislang auf vereinfachten und umstrittenen Methoden. In diesem Projekt kombinieren wir den traditionellen Ansatz, die räumliche Projektion von analogen Klimaten unter einem angenommenen Erwärmungsszenario, mit demographischen Simulationen von Pflanzen-Populationen und der Modellierung von räumlichen Ausbreitungsprozessen der Pflanzensamen. Dieser kombinierte Ansatz prädiziert bis zum Ende des 21. Jahrhunderts geringere Arealverluste als bisher erwartet, suggeriert aber gleichzeitig, dass das Aussterben lokaler Populationen der Veränderung lokaler Klimabedingungen erst mit jahrzehntelanger Verspätung folgt. Die in den kommenden Jahrzehnten beobachtbaren Arealverluste dürften daher die langfristigen Konsequenzen der Klimaerwärmung für die Alpenflora unterschätzen.



Stefan Dullinger
Abteilung für Naturschutzforschung, Vegetations- und Landschaftsökologie
Universität Wien

High performance solar cells (HiPerSol)

Eine der größten Herausforderungen unserer Gesellschaft ist der Ersatz der derzeitigen Technologien durch erneuerbare Energiequellen. Solarzellen spielen dabei eine bedeutende Rolle. Um die Leistung der derzeitigen Solarzellen zu verbessern, sind Kenntnisse über die Geometrie und Elektronenstruktur der Übergänge zwischen kristallinem Silizium und amorphen Siliziumnitriden, die als Schutzschicht verwendet werden, ausschlaggebend. Wir verwenden in großen Maßstäben parameterfreie molekulardynamische Simulationen, um die Eigenschaften der amorphen Siliziumnitride sowie der Übergänge zwischen kristallinem Silizium und kristallinen/amorphen Siliziumnitriden zu erforschen. Namentlich wollen wir die Natur von Elektronenfallen verstehen, die den Wirkungsgrad verschlechtern. Dies wird letztlich helfen, industriell gefertigte Solarzellen zu verbessern.

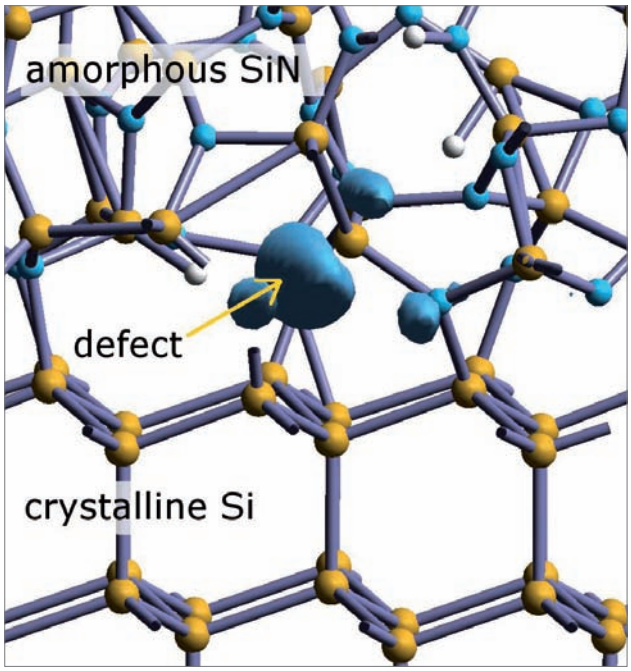
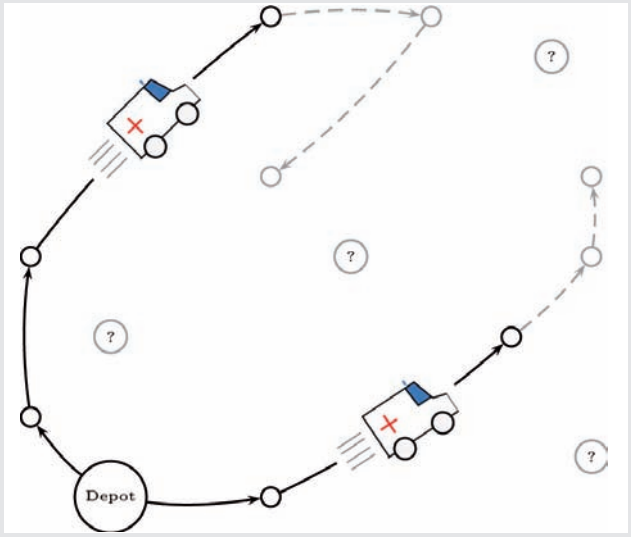


Abbildung: unterkoordinierte Siliziumatome an der Grenzfläche bilden ein „Falle“ für Ladungsträger. An diesem Zentrum können sich Elektronen und Löcher ausgleichen, was den Wirkungsgrad verschlechtert.

Georg Kresse
Computergestützte Materialphysik
Universität Wien

Lösung dynamischer Touren- und ressourcenbeschränkter Projektplanungsprobleme

Dynamische Tourenplanungsprobleme beschäftigen sich mit der Zuordnung von Transportaufträgen zu Fahrzeugen und deren Reihenfolgeplanung in Echtzeit. Für das Rote Kreuz entwickelten wir verschiedene Lösungsverfahren, die stochastische Information über zukünftige Transportaufträge einbeziehen, mit dem Ziel die Servicequalität insgesamt zu erhöhen. Die dazu notwendigen Simulationsläufe wurden erfolgreich am Vienna Scientific Cluster ausgeführt.
Das Problem der Zuordnung von Startzeiten zu einer bestimmten Anzahl von Aufgaben unter Ressourcen- und Vorgängernebenbedingungen ist bekannt als das ressourcenbeschränkte Projektplanungsproblem. Praktische Anwendungsgebiete dieses NP-schweren Problems reichen von der Produktion in der Automobil- und Prozessindustrie bis hin zu IT und Filmprojekten. In unseren Rechenexperimenten am Vienna Scientific Cluster analysieren wir rezente exakte Verfahren und versuchen diese durch Parallelisierung zu verbessern.

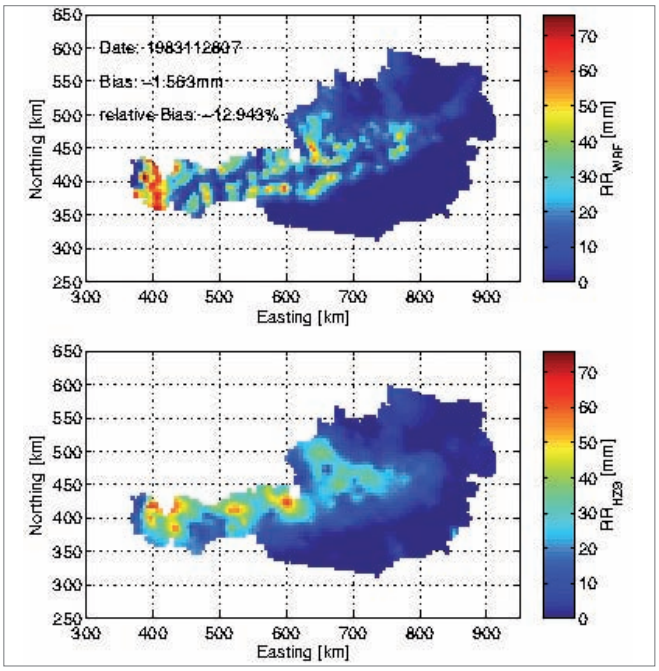


Karl F. Doerner, Richard F. Hartl, Attila A. Kovacs, Sophie N. Parragh, Michael Schilde,
Alexander Schnell, Wolfgang Summerauer, Belma Turan, Verena Schmid
Production and Operations Management Group (POM)
Universität Wien

MetGIS

Im Rahmen des FWF Projekts „Optimization of GIS-based Meteorological Forecast Systems“ (Translational-Research-Program L696-N15) werden numerische Wettervorhersagen mit hoch aufgelösten Orographiedaten verfeinert. Um in alpinen Gebieten die meteorologischen Parameter besser vorherzusagen, wird dynamisches „downscaling“ als zusätzliche Verbesserung der numerischen Vorhersagen angewendet. Dafür wird WRF (Weather Research and Forecast model) herangezogen, ein open source Modell, das in Meteorologenkreisen weit verbreitet ist.

Das Experiment, das auf dem VSC durchgeführt wurde beinhaltete die Simulation von ~5000 Niederschlagsereignissen in den Alpen (siehe Grafik). Die dabei erzielten Ergebnisse wurden mit Niederschlagsbeobachtungen verifiziert und validiert.

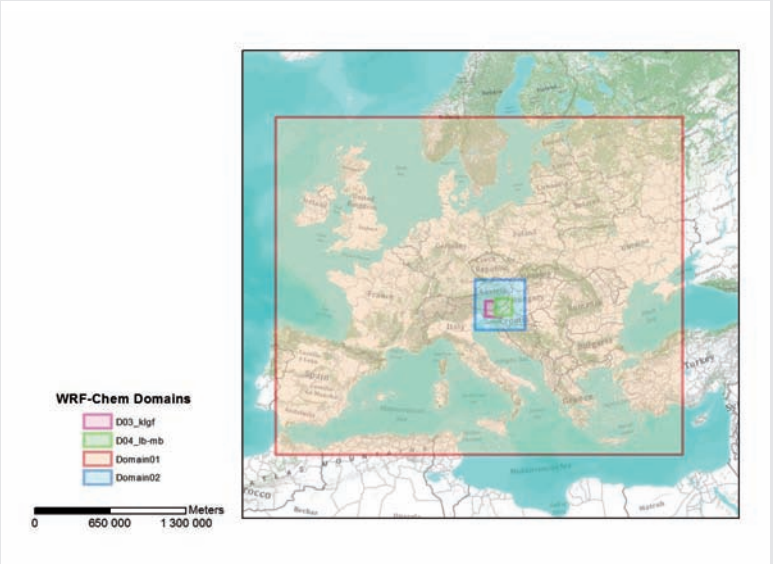


Die Abbildung zeigt die Simulation des Niederschlags am 28. November 1983 (oben), und Analyse der Beobachtungen (unten)

Stefan Sperka, Gerald Spreitzhofer
Institut für Meteorologie und Geophysik
Universität Wien

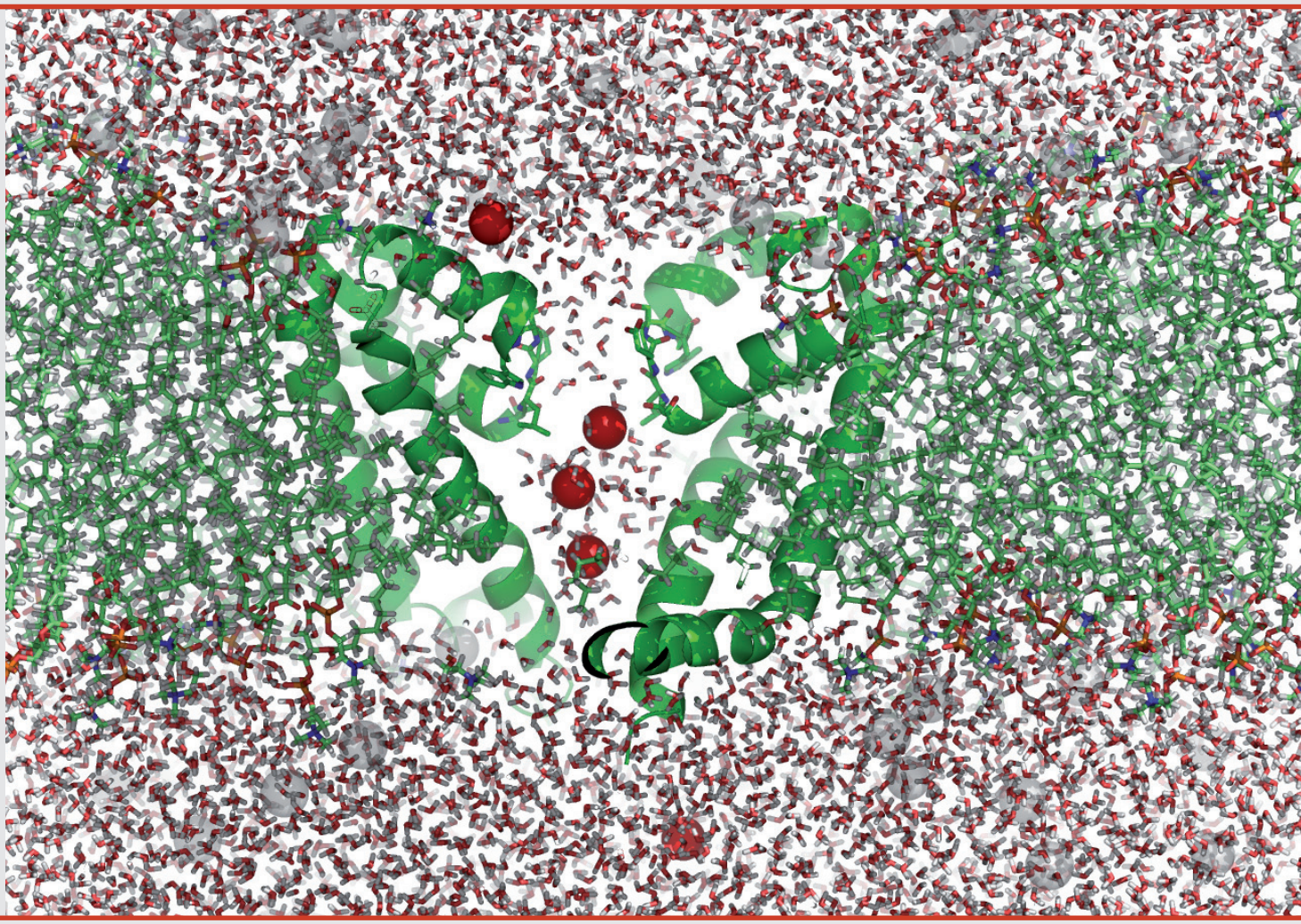
PMinter

Auf dem VSC werden Luftgüteberechnungen im Rahmen des EU-Forschungsprojektes PMinter in drei Kernregionen (Südsteiermark, Nordslowenien und Unterkärnten) durchgeführt. Diese aufwändigen Modellierungsarbeiten umfassen komplexe, gekoppelte, meteorologische, luftchemische und aerosoldynamische Prozesse in einem weiten Skalenbereich, d.h. von Europa bis hin zu den Kerngebieten Leibnitz, Maribor und Klagenfurt. Die Hauptziele der Modellierungsarbeiten sind ein verbessertes Prozessverständnis, das durch Kopplung der Modelle WRF-Chem (regionale Skala, Auflösungen ~50km – 1km) und GRAMM/GRAL (Mikro Skala, Auflösungen ~500m – 5m) erreicht werden soll, um verbesserte Aussagen zum Einfluss des regionalen Transports, sekundär gebildetem Aerosol, sowie des Hausbrands an Feinstaub-Grenzwertüberschreitungen zu treffen und bessere Luftreinhaltepläne zu erstellen.



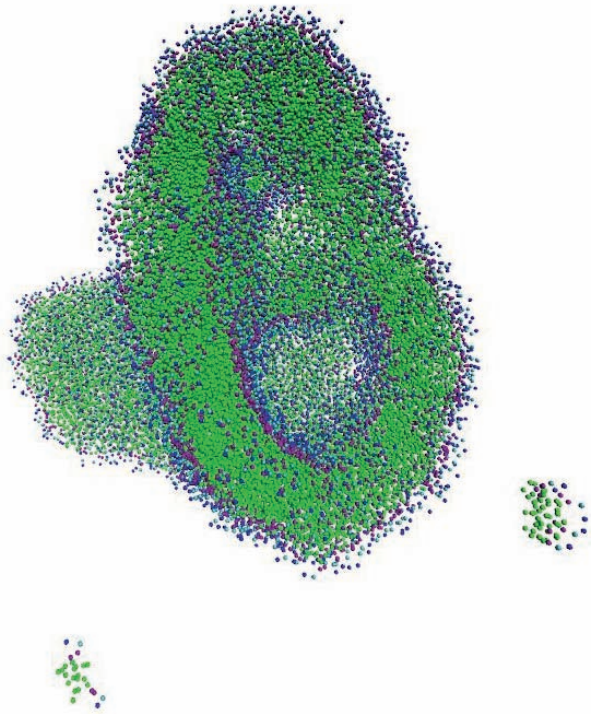
Martin Steiner
Institut für Verbrennungskraftmaschinen und Thermodynamik
Technische Universität Graz

Gesundheit



Arzneimitteltransport

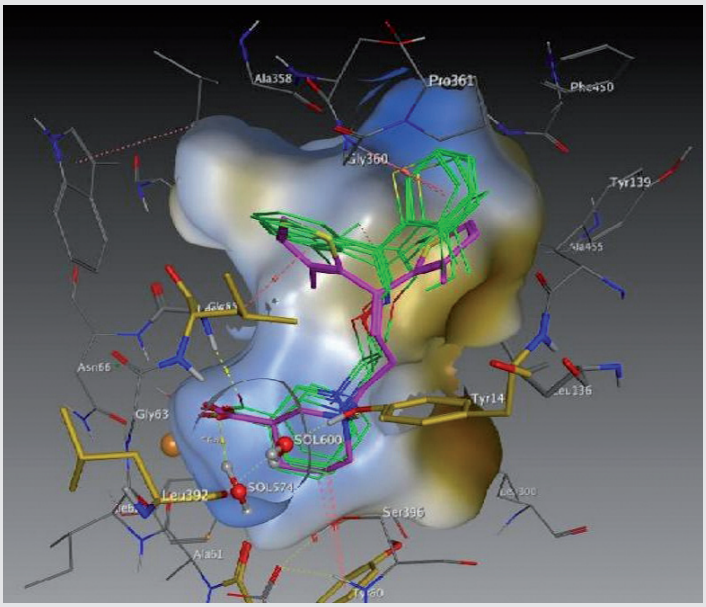
Liposome werden zum Transport von Arzneimitteln im Körper eingesetzt. Um eine gezielte Abgabe eines Medikaments zu einer bestimmten Zeit bzw. an einem bestimmten Ort im Körper durchzuführen, ist es notwendig einen Mechanismus zu finden, der eine kontrollierte Freisetzung von Nanopartikeln aus Liposomen sicherstellt. Um diesen Vorgang auf mikroskopischem Niveau zu untersuchen, studierten wir zunächst den Self-Assembly Prozess von POPC Lipiden mittels Molekulardynamiksimulationen. Wir konnten die Bildung von Mizellen Doppelschichten, sowie Vesikeln beobachten. Im nächsten Schritt werden nun Nanopartikel in die Lipsomenmembran eingebracht und ihr Verhalten studiert.



Elisabeth Schöll-Paschinger
Verfahrens- und Energietechnik (IVET)
Universität für Bodenkultur Wien

Anwendung von Molekulardynamiksimulationen für die Studie von membranständigen Transportproteinen

Im Rahmen des vom FWF (Wissenschaftsfonds) geförderten Projekts „Transmembrane Transporters in Health and Disease“ SFB35 (Sonderforschungsbereich 35) verwendeten wir das Molukulardynamiksimulationsprogramm GROMACS 4.5.3. für die Validierung und Optimierung von Homologiemodellen von transmembranären Proteinen der NSS (neurotransmitter sodium symporter) Familie. Zusätzlich erlaubte diese Methode ein Sampling des Konformationsraums solcher Transporter Modelle und half die Bindungsmodi verschiedener Liganden zu studieren (z.B. Tiagabinanaloga im humanen GABA Transporter 1, siehe Abbildung).

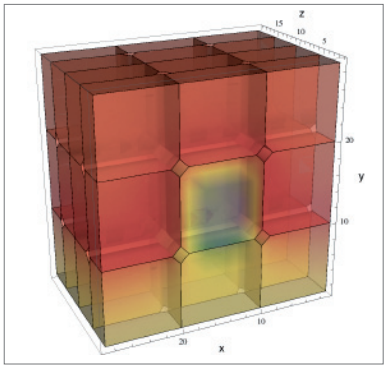


Gerhard Ecker
Institut für Medizinische Chemie, Pharmacoinformatics Research Group
Universität Wien

Mathematische Modelle für und Charakterisierung von BioFETs

Nanodrähte, verwendet als biologisch sensitive Feldeffekttransistoren (BioFET), sind vielversprechende markierungsfreie Sensoren mit einer Vielzahl von Anwendungen, wie zum Beispiel die Detektion von DNA oder Krankheitserregern, oder auch, wie kürzlich gezeigt, der Nachweis von Proteinen in Blut. Trotz des experimentellen Fortschritts der letzten Jahre und der angehenden Massenproduktion fehlt nach wie vor das quantitative Verständnis dieser Sensoren und somit ist mathematische Modellierung und Simulation ausschlaggebend um optimale Detektion zu erreichen. Wir entwickelten einen parallelen und selbstkonsistenten Simulator für ein homogenisiertes System von partiellen Differentialgleichungen, welches die Drift-Diffusionsgleichungen beinhaltet. Infolge der Geometrie und der 3D Struktur von solchen Biosensoren im Nanobereich ist paralleles Lösen unausweichlich. Die Parallelisierung besteht aus einer Abwandlung der FETI Methode. Nun können zum ersten Mal die Sensitivität und Funktionalisierungseigenschaften, sowie deren Abhängigkeit von den Sensorparametern, untersucht werden.

Clemens Heitzinger, Stefan Baumgartner, Gerhard Tulzer
Institut für Mathematik
Universität Wien



Die Abbildung zeigt ein einfaches Beispiel für einen Nanodraht-Feldeffekttransistor. Die Farben beziehen sich auf die Werte des elektrischen Potentials im Sensor. Im unteren Teil (gelber Bereich) wird die Poisson Gleichung für das Siliziumdioxid gelöst, der mittlere Teil (blauer Bereich) ist durch das Poisson Drift-Diffusions System modelliert und die Umgebung des Nanodrahtes (roter Bereich), welcher die wässrige Lösung mit der Grenzschicht und den detektierbaren Molekülen enthält, ist durch ein Poisson-Boltzmann Modell beschrieben. Weiters sieht man die Abweichungen des Potentials durch die Dirichlet Randbedingungen für Ohmsche Kontakte am Boden und am Ende des Nanodrahts (blauer Bereich). Die Gebietszerlegung für die Parallelisierung wurde ebenfalls kenntlich gemacht – das Potential wird auf 36 Blöcken gelöst, welche durch Lagrange Multiplikatoren zusammengefügt werden.

Dissoziation von hERG Kanalinhibitoren

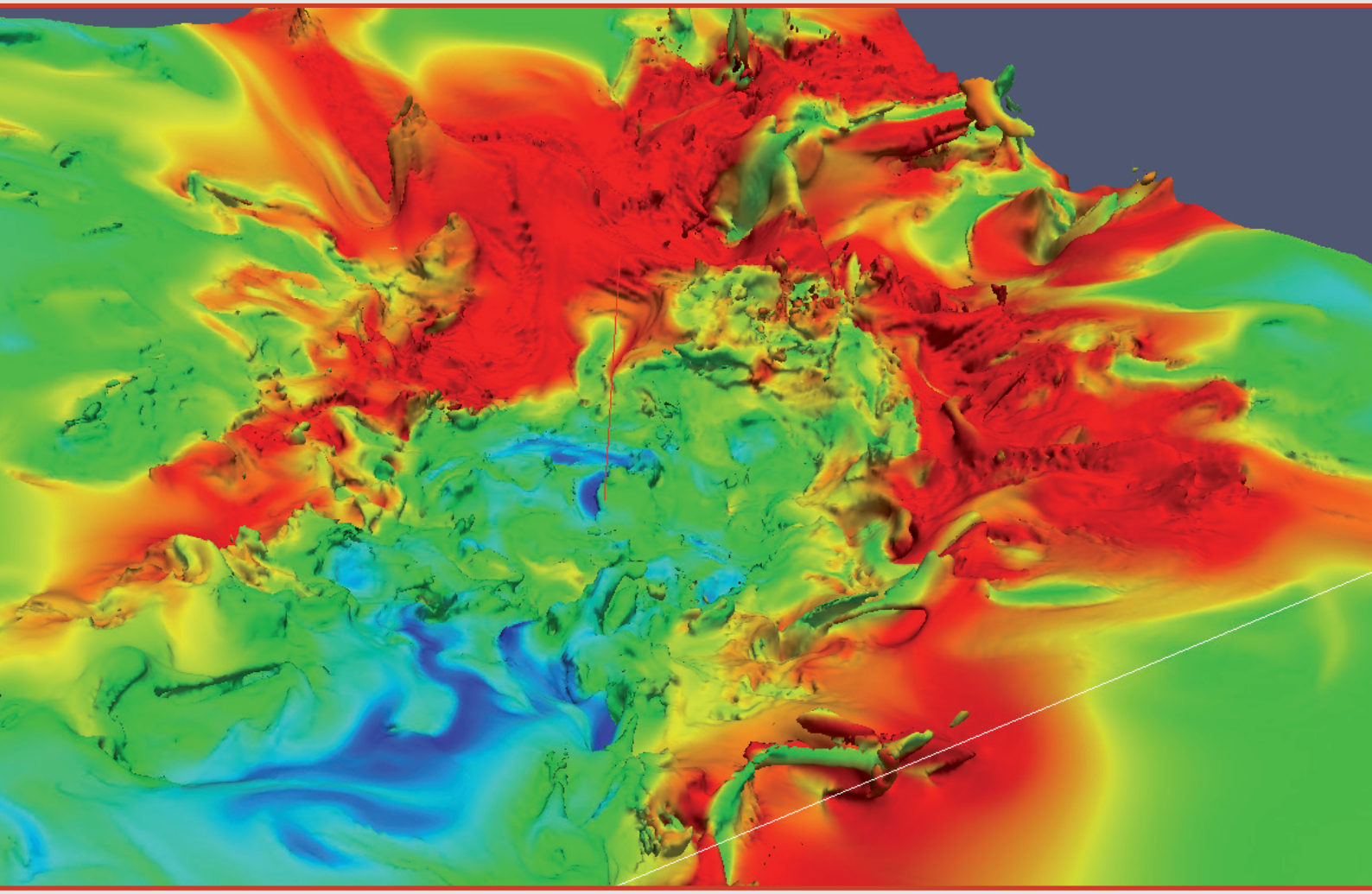
Erforschung von unerwünschten Arzneistoffinteraktionen am hERG Kanal

Spannungsgesteuerte Ionenkanäle sind Proteine, welche sich in der Membran von Herz-, Nerven- und glatten Muskelzellen befinden. Sie ermöglichen den passiven Transport von Ionen entlang eines elektrochemischen Gradienten. hERG Kanäle spielen eine entscheidende Rolle in der Repolarisierungsphase im menschlichen Herz. Störungen des ventrikulären Aktionspotentials, ausgelöst durch Medikamente, welche den hERG Kanal blockieren, können zu lebensbedrohenden Arrhythmien führen. In diesem Projekt werden mithilfe von Molekulardynamiksimulationen die unerwünschten Interaktionen von Arzneistoffen mit dem hERG Kanal berechnet. Ein besseres Verständnis der zugrunde liegenden molekularen Mechanismen ist wichtig um in Zukunft Arzneistoffe entwickeln zu können, welche diesen Kanal nicht blockieren.



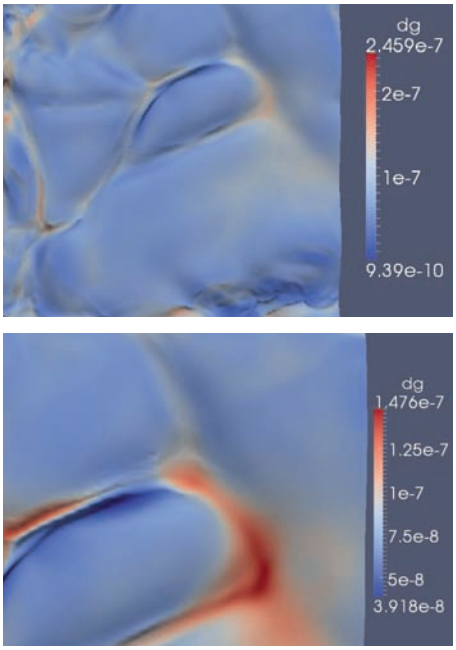
Anna Weinzinger
Department für Pharmakologie und Toxikologie
Fakultät für Lebenswissenschaften
Universität Wien

Astronomie/Astrophysik



Numerische Simulationen von Sternen der mittleren Hauptreihe

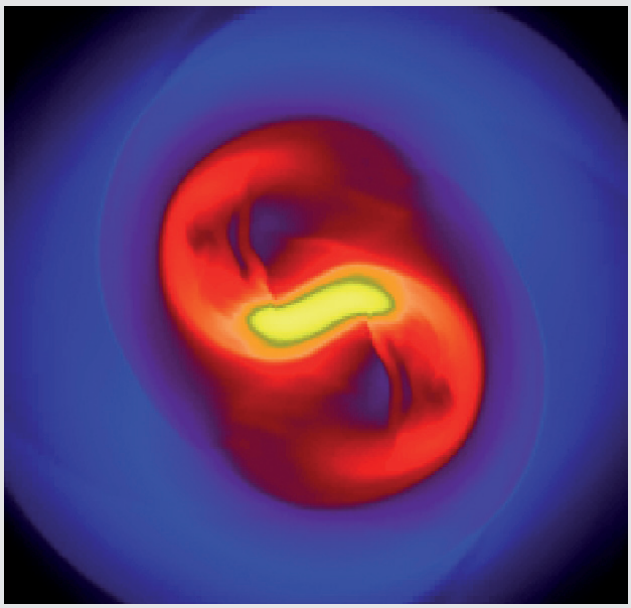
Sterne mit einer Masse, die bis zu dreimal höher als jene der Sonne ist, und die ihre Energie durch Kernfusion von Wasserstoff in ihrem Zentrum beziehen, die „Sterne der mittleren Hauptreihe", erlauben die Erforschung hydrodynamischer Prozesse, Konvektion und Pulsation, unter physikalischen Bedingungen, welche sich mit zunehmender Masse mehr und mehr von jener Situation unterscheiden, wie wir sie in der Sonne vorfinden. Solche Sterne werden auch im Rahmen von Satellitenmissionen mit österreichischer Beteiligung (MOST, COROT, BRITE Constellation) untersucht. Das Hydrodynamikprogramm ANTARES ermöglicht die Computersimulationen von Teilregionen nahe der beobachtbaren Oberfläche solche Objekte. Beide Zugänge, die Satellitenastronomie und die Simulation am Computer, erlauben zusammen die Erforschung von Gemeinsamkeiten und Unterschieden zwischen diesen Sternen und unserer Sonne.
Die Abbildung zeigt einen Ausschnitt aus einer Simulation des Sterns HD 49385 (Konstellation Monoceros). Die Dichte (in g cm^{-3}) ist dabei farbcodiert für jene Fläche, bei der die Temperatur genau 6000 K beträgt (Betrachtungswinkel senkrecht nach außen gerichtet). Aus dem größeren Gebiet, welches in der oberen Abbildung gezeigt ist, wurde ein unten dargestellter Ausschnitt mit hoher räumlicher Auflösung gerechnet. Erst bei dieser Auflösung zeigt sich im Lauf der weiteren Rechnung die turbulente Natur dieser Strömung.



Friedrich Kupka, Hannes Grimm-Strele, Herbert Muthsam
Institut für Mathematik
Universität Wien

FLASH

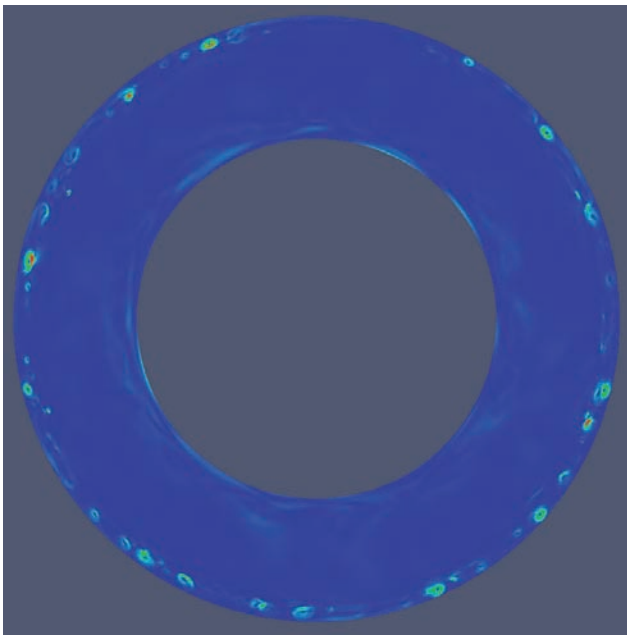
Die chemischen und dynamischen Eigenschaften von Galaxien und ihrer Satellitengalaxien beinhalten eine Fülle an Informationen über Sternentstehung, chemische Anreicherung durch Sternenwinde und die exotische Dunkle Materie. Um die komplexen Prozesse des kosmischen Materiekreislaufs in Galaxien zu modellieren, ist der Einsatz von Codes hoher numerischer Genauigkeit notwendig, die Rechencluster von der Größe des VSC effektiv nutzen können.
Auf der Basis des adaptiven Gittercodes FLASH hat unsere Gruppe am IfA-UW einen innovativen Algorithmus (cd-FLASH) zur Lösung stellar-hydrodynamischer Systeme entwickelt, welcher viele technische und wissenschaftliche Probleme beseitigt. Dadurch können wir die chemo-dynamische Entwicklung mehrerer Komponenten und Phasen von Galaxien in wegweisenden Simulationen studieren.



Nigel Mitchell
Institut für Astronomie
Universität Wien

Mehrdimensionale Modelle von Cepheiden

Cepheiden sind Sterne, die radialsymmetrisch pulsieren und dadurch im Zuge einer Pulsationsperiode ihre Helligkeit ändern. Die ausgestrahlte Energiemenge hängt von der gut beobachtbaren Periode ab. Dies wird zur Eichung der kosmische Entfernungsskala genutzt, daher ihre große Bedeutung (beinahe 1 Million Google Treffer „cepheids“). Bisherige Rechnungen haben sich fast ausnahmslos auf geometrisch eindimensionale Modelle bezogen. Wir konstruieren zweidimensionale Modelle mit der weltweit mit großem Abstand höchsten Auflösung. Nur durch diese numerisch schwierigen und aufwändigen Simulationen können wir die wichtige Wechselwirkung zwischen Pulsation und Konvektion angemessen studieren. Es zeigen sich unter anderem gravierende Defizite in den bisherigen Konvektionsmodellen. Unsere Rechnungen werden zunehmend zum Verständnis dieser Sterne beitragen.

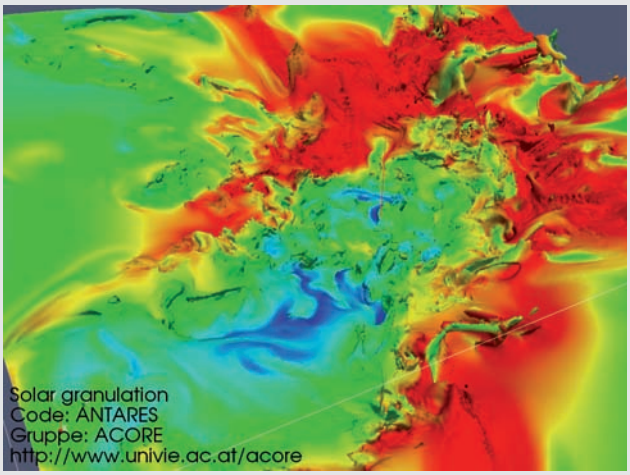


Die Abbildung zeigt die Verteilung der Konvektionszellen in einem Ring. Die Verteilung ist unregelmäßig und der mittlere Abstand ist in der Tat deutlich größer als 10°.

Eva Mundprecht, Herbert Muthsam
Fakultät für Mathematik
Universität Wien

Dynamik solarer Granulation

Solare Granulation ist die äußerste Manifestation der Konvektion im Sonnenkörper und als solche gut beobachtbar. Heiße Gase steigen auf, strahlen Energie in den Weltraum, kühlen so ab und sinken in Abströmkanälen wieder nach unten. Granulation wird mit Sonnenteleskopen und Satellitenmissionen in zunehmender Auflösung untersucht. Unsere Gruppe ACORE erforscht die Granulation mit Hilfe numerischer Modelle auf Basis unseres Hydrodynamikprogramms ANTARES. Dabei erzielen wir auf Grund hochwertiger Numerik und der Verwendung von Gitterverfeinerung die weltweit höchste Auflösung, was uns ein besonders gutes Studium der turbulenten Strömungen erlaubt. Mit zunehmender Auflösung zeigt sich eine stark wachsende Zahl von Wirbelröhren in den turbulenteren Gebieten.

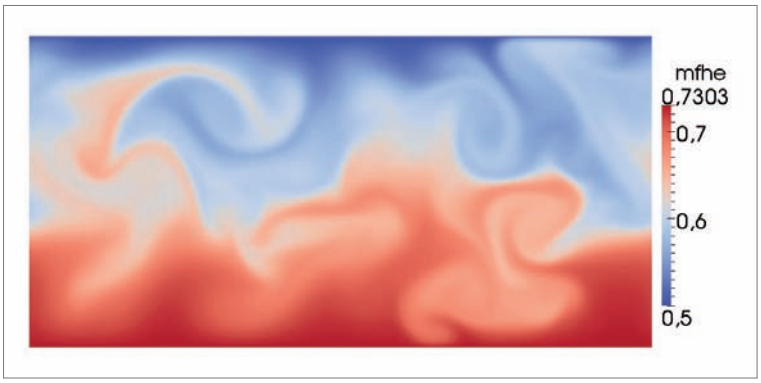


In der Abbildung ist die Modellierung eine kleinen Teils der Sonnenoberfläche zu sehen: Abströmgebiet einer Sonnengranule. Dies ist der rauh erscheinende Teil in der Fläche, die einer Temperatur von 6.000K entspricht (etwa die Tiefe, bis zu der man in die Sonnen hineinsieht). Farbcodierung: rot für Abströmungen, blau für aufsteigendes Material. Man beachte die glatteren Gebiete nahe den Rändern, breite Aufströmgebiete, eben die Granulen. Eine derartige Auflösung übertrifft bei weitem, was Teleskope zu zeigen vermögen.

Herbert Muthsam, Hannes Grimm-Strele, Friedrich Kupka
Fakultät für Mathematik
Universität Wien

Numerische Modellierung der Semikonvektion

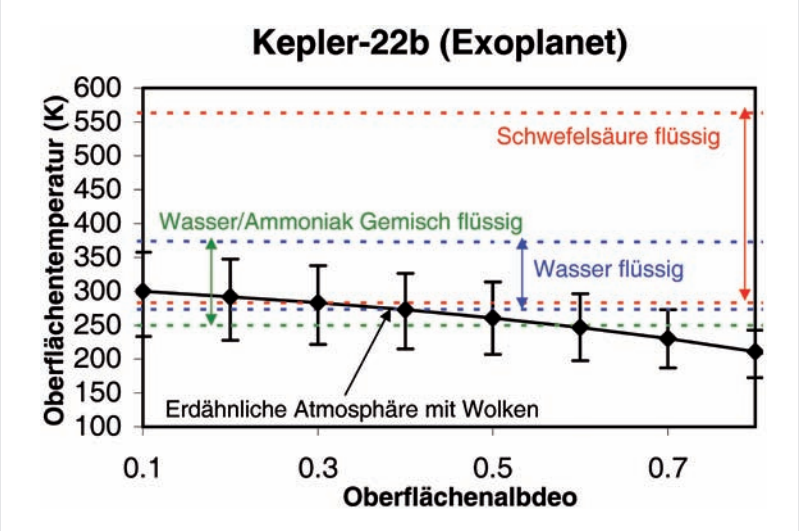
In massereichen Sternen tritt Semikonvektion auf. Während bei gewöhnlicher Konvektion nur die Temperatur eine Rolle spielt (heißes Material steigt auf, kühles sinkt ab), kommt bei der Semikonvektion die chemische Inhomogenität dazu: im Sterninneren ist nuklear prozessiertes Material (Helium) häufiger als außen (wo der Wasserstoffanteil höher ist). Dadurch erhöht sich innen das mittlere Molekulargewicht und beeinflusst die Fähigkeit des Gasgemisches, aufzusteigen. – Studien der Sternentwicklung erfordern Kenntnisse über Semikonvektion. Indessen ist noch nicht einmal bekannt, ob dort (wie beim latte macchiato) übereinander gestapelte, durch eine schmale Zwischenschicht getrennte konvektive Bereiche auftreten. Erst jüngst beginnen intensive Untersuchungen dazu durch numerische Modellbildung. Wir trachten, physikalischen Eigenschaften im Stern möglichst nahe zu kommen.



Herbert Muthsam, Natalie Happenhofer, Friedrich Kupka
Fakultät für Mathematik
Universität Wien

Die „life supporting zone“: Wolken und Strahlungstransfer in der Atmosphäre von (Exo)Planeten

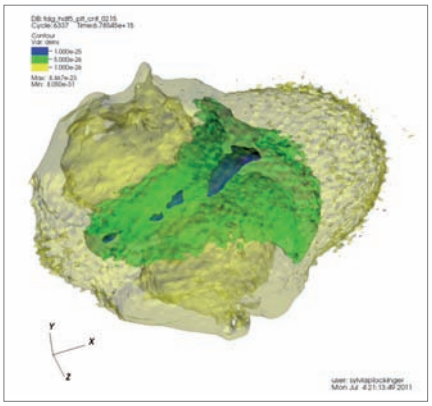
Leben (exotisches Leben) kann theoretisch nicht nur auf Wasser sondern auch auf alternativen Lösungsmitteln basieren. Die habitable Zone ist die Region um ein Zentralgestirn, in der flüssiges Wasser auf der Oberfläche eines Planeten existieren kann. Die „life supporting zone“ (LSZ) ist eine Erweiterung des Konzepts der habitablen Zone für alternative Lösungsmittel und wird aus der Summe der individuellen habitablen Zonen der Lösungsmittel gebildet. Für die Berechnung der Oberflächentemperatur von (hypothetischen, erdähnlichen) Exoplaneten haben wir ein Klimamodell entwickelt und ein Wolkenmodell adaptiert. Verschiedene atmosphärische Szenarien inklusive Wolken werden für die Berechnung der habitablen Zonen der Lösungsmittel verwendet.



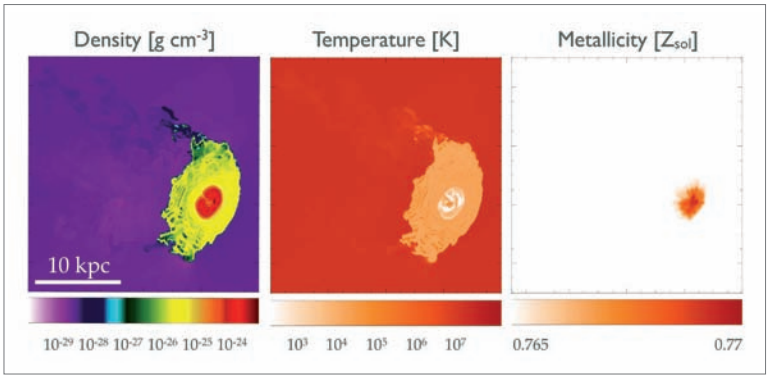
David Neubauer
Forschungsplattform ExoLife
Universität Wien

Zwerggalaxien

Innerhalb des Kosmologischen Standardmodells (LCDM) bilden sich Strukturen zuerst auf kleinen Skalen und verschmelzen schließlich zu größeren Strukturen. Die heutigen Zwerggalaxien wären in diesem Bild die Überreste dieser kosmologischen Bausteine. Erstaunlicherweise wird die Entstehung von neuen Zwerggalaxien in den Gezeitenarmen von wechselwirkenden Galaxien beobachtet. Sie werden direkt auch den Sternen und Gas der ursprünglichen Galaxien gebildet und enthalten keine dunkle Materie.
Wir simulieren die chemo-dynamische Entwicklung von „Gezeiten-Zwerggalaxien" um herauszufinden, ob sich diese in Objekte entwickeln können, die klassischen Zwerggalaxien ähneln. Die Erklärung der Existenz und andauernden Neubildung von „Gezeiten-Zwerggalaxien" stellt eine Herausforderung für LCDM dar.



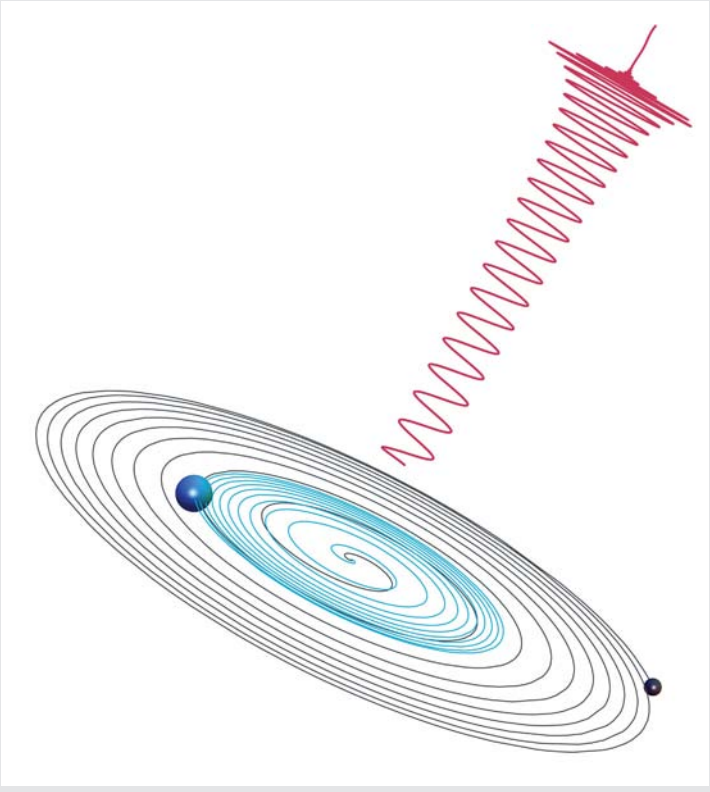
Die Abbildung zeigt Dichte, Temperatur und Metallizität der simulierten Gezeitenzwerggalaxie nach 390 Millionen Jahren. Sternentstehung und Supernova Explosionen führen zu einer intrinsischen Energiezufuhr, während sich die Zwerggalaxie mit 200 km/s in einem starken äußerem Gezeitenfeld bewegt.



Sylvia Plöckinger, Gerhard Hensler
Institut für Astronomie
Universität Wien

Kollisionen Schwarzer Löcher

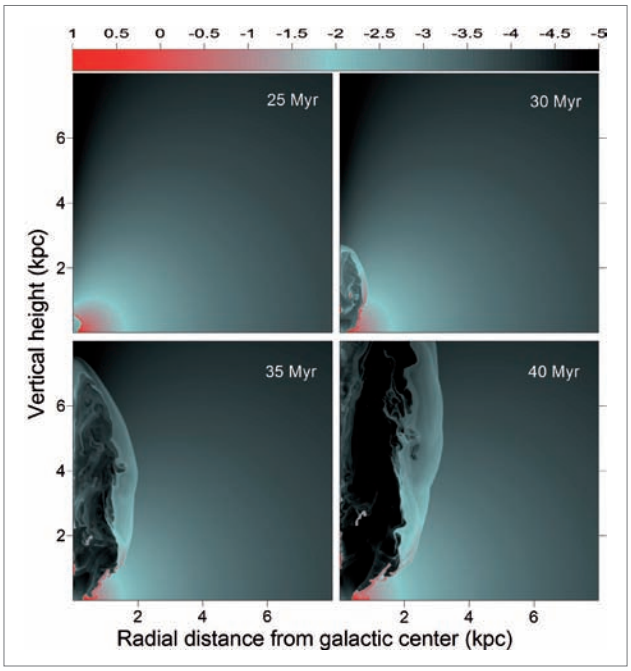
Wir berechnen einen der heftigsten Prozesse im Universum seit dem „Big Bang": die Verschmelzung von Schwarzen Löchern. Ziel der Simulationen ist die direkte Beobachtung der Gravitationswellen, die bei der Verschmelzung Schwarzer Löcher abgestrahlt werden. Gravitationswellen sind Vibrationen der Raumzeit, die von Einsteins allgemeiner Relativitätstheorie vorhergesagt werden. Sie werden durch beschleunigte Massen erzeugt und sind viel schwächer als elektromagnetische Wellen, von denen unser gesamtes Wissen über den Kosmos stammt. Die Beobachtung von Gravitationswellen wird uns ein neues Fenster zum Universum öffnen, das auch über seine „dunkle Seite" Auskunft geben wird.



Michael Pürrer
Gravitationsphysik
Universität Wien
und
School of Physics & Astronomy
Cardiff University

Chemodynamical Evolution of Dwarf Spheroidal Galaxies

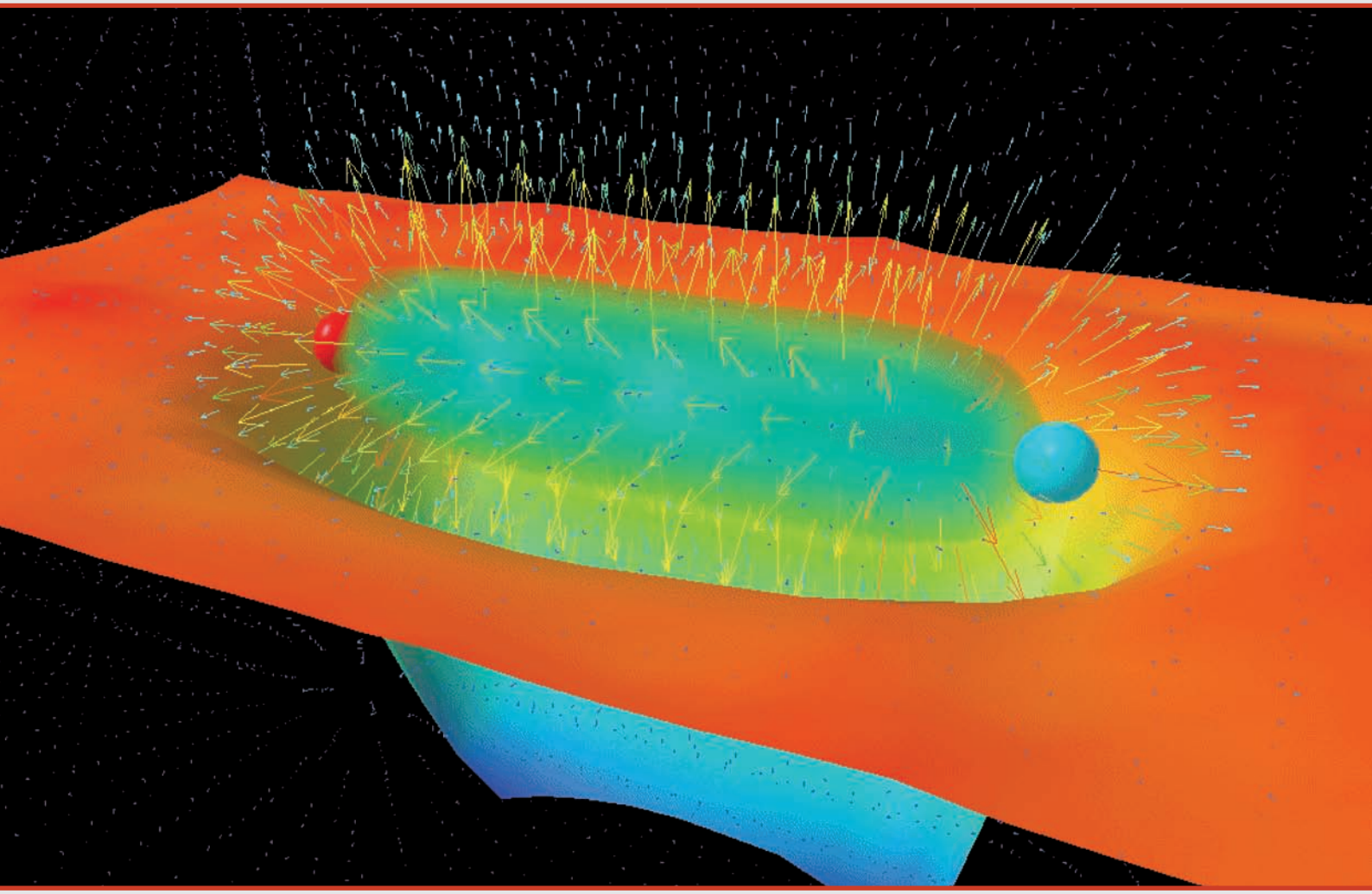
Im Rahmen dieses Projekts werden jene physikalischen Mechanismen studiert, welche zur Formation von gasarmen, sphärischen Zwerggalaxien mit ungewöhnlich niedriger Zusammensetzung aus chemischen Elementen führen. Wir lösen dabei ein gekoppeltes System von hydrodynamischen Gas- und Stern-Gleichungen, um die Zeitentwicklung solcher Zwerggalaxien mit unterschiedlichen Massen, Rotationsverhalten und chemischer Zusammensetzung zu simulieren. Die Gleichungen der Gas- und Sternendynamik werden mit Hilfe einer Variante der Finiten-Volumen-Diskretisierungsmethode mit Advektion von Flüssigkeitsvariablen unter Verwendung einer stückweisen parabolischen Interpolationsmethode dritter Ordnung auf einem zylindrischen Gitter gelöst. Die Grafik zeigt die Formierung einer Blase welche durch die Energiefreisetzung von Sternen und Supernova Explosionen unserer Modell-Galaxie ausgelöst wird. Die Farbskala zeigt dabei die Gasteilchendichte in cm^{-3}. Die Blase ist gefüllt mit heißem und verdünntem Gas, welches mit schweren Elementen angereichert ist, die durch einen Synthetisierungsprozess während der Supernova-Explosion entstanden sind.



Eduard Vorobiev
Institut für Astronomie
Universität Wien

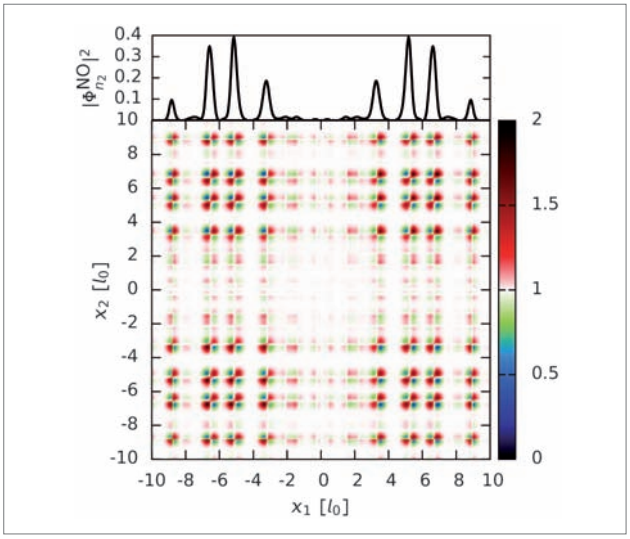


Grundlagenforschung



Bose-Einstein-Kondensate

Bose-Einstein-Kondensate ermöglichen die Untersuchung von quantenmechanischen Vielteilcheneffekten mit beispielloser experimenteller Kontrolle. In Kombination mit theoretischen und numerischen Berechnungen können so tiefe Einsichten über quantenmechanische Vielteilchenphysik gewonnen werden. In diesem Projekt wurde die Expansion von Bose-Einstein-Kondensaten in externen quasi-eindimensionalen Potentialen untersucht. Zur Anwendung kamen die Standardmethode, welche die Gross-Pitaevskii Gleichung heranzieht, sowie eine ausgeklügelte Vielteilchenmethode, die zeitabhängige Multikonfigurations-Hartree-Methode für Bosonen. Durch den Vergleich dieser Ansätze konnte gezeigt werden, dass die Gültigkeit der Gross-Pitaevskii Gleichung für die betrachteten Systeme zusammenbricht, da Teilchen aus dem Kondensat dynamisch angeregt werden. Ein nicht vernachlässigbarer Anteil an angeregten Teilchen geht Hand in Hand mit dem Verlust der Kohärenz. In der Abbildung wird die Dichte der angeregten Teilchen verglichen mit einer Korrelationsfunktion als Funktion der örtlichen Variablen, welche den Verlust der Kohärenz misst. Abweichungen der Korrelationsfunktion von 1 deuten auf Verlust der Kohärenz hin.

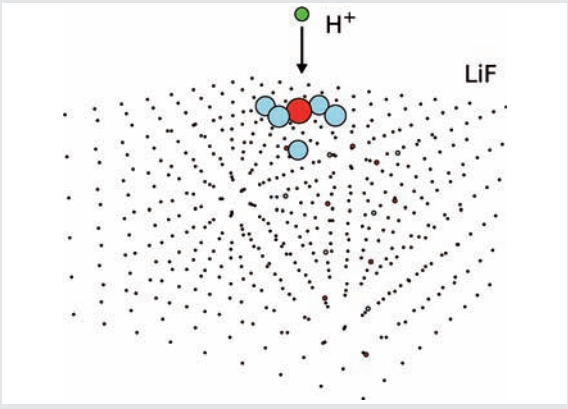


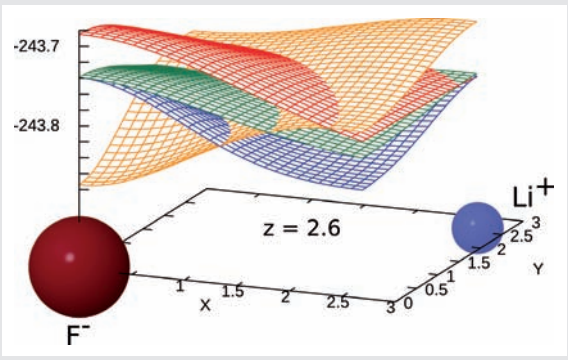
Iva Brezinova
Institut für Theoretische Physik
Technische Universität Wien

Ladungs-Transfer Dynamik von Ion-Oberflächen Streuprozessen

In diesem Projekt berechnen wir die Dynamik von Ladungstransfer in Streuprozessen von Ionen (H^+) an Oberflächen (LiF): ein auf die Oberfläche einfallendes H^+ Ion (grünes Atom in der Abbildung) kann mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit ein Elektron von einem negativ geladenen Fluor-Atom der Oberfläche (rotes Atom in der Abbildung) einfangen. Für diese Untersuchungen benötigen wir eine Kombination von sehr genauen quantenchemischen Methoden, um Potentialenergieflächen auszurechnen (Abbildung unten) und nicht-adiabatischen Methoden (quantendynamische und klassische Dynamik), die diese Potentialflächen verwenden. Die Potentialenergieflächen werden aus 60000 einzelnen Rechnungen für jede einzelne Position mithilfe von parallelen Rechnungen auf mehreren Computerprozessoren bestimmt. Für einen Vergleich zum Experiment an diesem System müssen viele verschiedene Einfallsgeschwindigkeiten, -orte und -winkel des Ions auf die Oberfläche berechnet werden.

Die Abbildungen veranschaulichen die LiF Oberfläche mit einem einfallenden H^+ Ion und Potentialenergieflächen des Systems für verschiedene Positionen von H^+ oberhalb der Oberfläche.

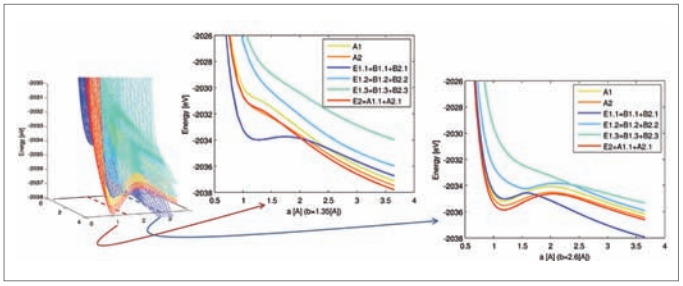




Paul Tiwald, Stefanie Gräfe, Joachim Burgdörfer
Institut für Theoretische Physik
Technische Universität Wien

Quantenchemische und quantendynamische Berechnung von kleinen organischen Molekülen in Laserfeldern

In diesem Projekt wird die Struktur und Dynamik von kleinen organischen Molekülen (Acetylen) in Laserfeldern untersucht. Wird das Molekül kurzer, ultravioletter Laserstrahlung ausgesetzt, verliert es mehrere Elektronen (Mehrfach-Ionisation) und besetzt mehrere elektronisch angeregte Zustände. Je kürzer der Laserpuls ist, desto mehr verschiedene Zustände können besetzt werden. Die meisten Zustände führen zu unterschiedlichen Zerfallsprodukten, die einen direkten Vergleich und Vorhersagen für experimentell detektierbare Größen erlauben. Außerdem können verschiedene Zustände koppeln oder kreuzen (Abbildung), was die computergestützte Beschreibung sehr schwierig macht: viele elektronische Zustände müssen mithilfe von quantenchemischen Methoden berechnet werden, aber auch dynamische Rechnungen, die die Kopplungen zwischen den Zuständen in mehreren Dimensionen berücksichtigen, müssen durchgeführt werden.

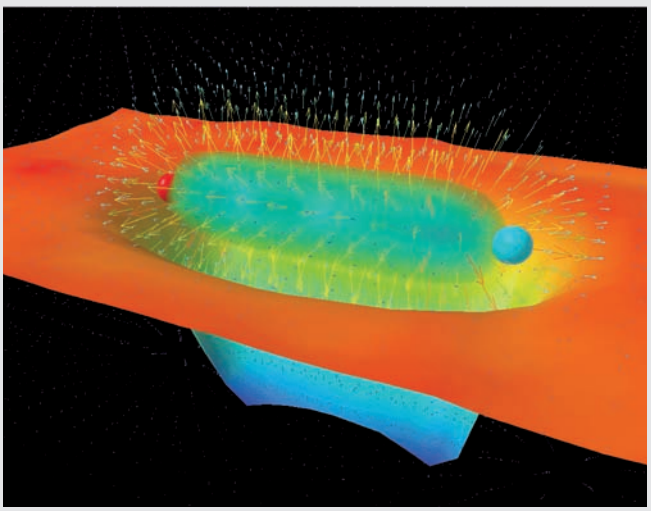


Die Abbildung zeigt Potentialflächen mehrerer elektronischer Zustände in zwei Dimensionen und Schnitte entlang ausgewählter Werte in einer Dimension, welche Kopplungen und Kreuzungen zwischen verschiedenen Zuständen visualisieren.

Katharina Doblhoff-Dier, Stefanie Gräfe
Institut für Theoretische Physik
Technische Universität Wien
externe Zusammenarbeit mit Hans Lischka und Felix Plasser an der Universität Wien

Quantenchromodynamik

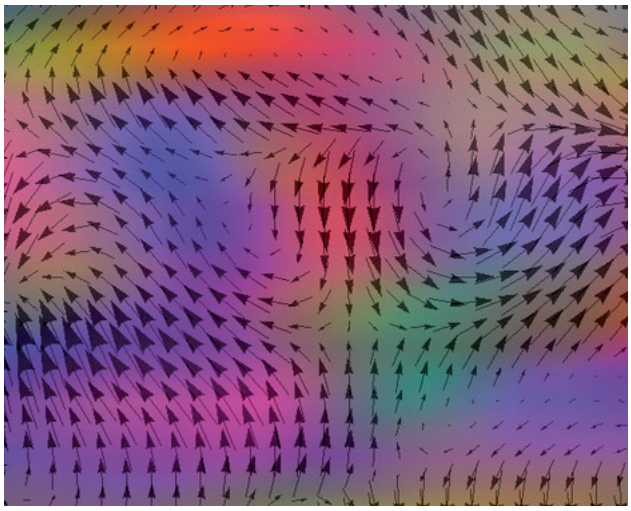
Die Quantenchromodynamik (QCD) beschreibt die starke Wechselwirkung, die fundamentale Kraft, die im Atomkern wirkt. In dieser Theorie sind die Kernteilchen (Protonen und Neutronen) aus drei noch fundamentaleren Teilchen, den so genannten Quarks, zusammengesetzt. Quarks konnten bislang jedoch nicht als freie Teilchen nachgewiesen werden, sie sind stets in Hadronen eingeschlossen. Diese als Quarkeinschluss bezeichnete Tatsache wird darauf zurückgeführt, dass die Kraft zwischen isolierten Quarks nicht so wie in der Elektrodynamik mit der Entfernung quadratisch abnimmt, sondern konstant bleibt, sodass die Ladungen nicht getrennt werden können. Diese Eigenschaft kann in der Formulierung der QCD auf einem diskreten Raum-Zeit-Gitter mit Hilfe numerischer Rechnungen gezeigt werden. Im Gegensatz zur Elektrodynamik breitet sich das farbelektrische Feld der QCD nicht im ganzen Raum aus, sondern ist zu einem Flussschlauch zwischen den Farbladungen gebündelt. Die Abbildung zeigt ein Quark-Antiquark Paar (roter & blauer Punkt) mit zugehörigem farb-elektrischem Feld (Pfeile) und dem Flussschlauch zwischen den Quarks.



Roman Höllwieser
Atominstitut
Technische Universität Wien

Das Quark-Gluon-Plasma – Berechnungen zu Experimenten am CERN

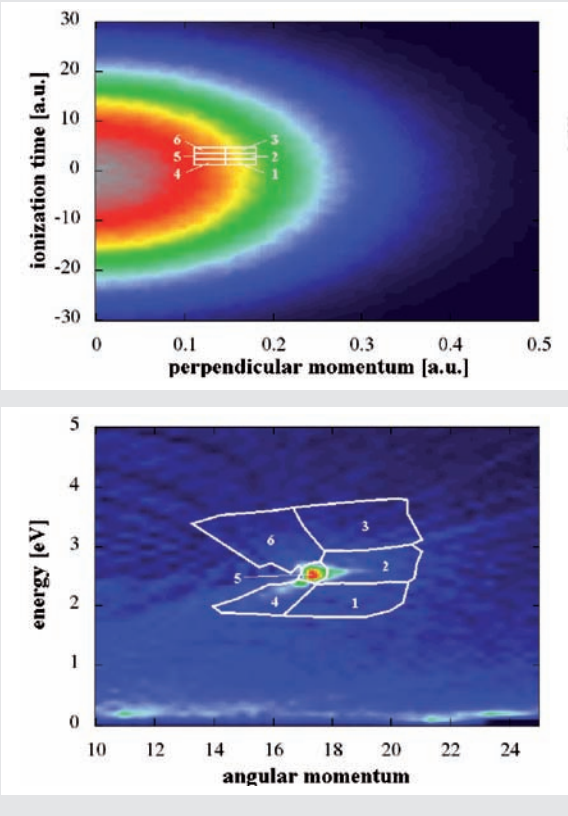
Sekundenbruchteile nach dem Urknall bestand das gesamte Universum aus Quark-Gluon-Plasma. Selbst für Protonen und Neutronen war es noch zu heiß. Die Elementarteilchen, aus denen sie aufgebaut sind – Quarks und Gluonen – konnten sich frei untereinander bewegen. Heute lässt sich dieser Materiezustand im Miniaturformat an großen Teilchenbeschleunigern reproduzieren. Nach wie vor gibt das Quark-Gluon-Plasma der Wissenschaft große Rätsel auf: So ist bis heute nicht genau geklärt, warum ein Quark-Gluon-Plasma gewissermaßen eine perfekte Flüssigkeit darstellt. Seine Viskosität – ein Maß für die Zähigkeit einer Substanz – ist niedriger als bei allen Flüssigkeiten, die wir kennen. Außerdem ist unklar, wie die Teilchen ihre Geschwindigkeiten und Richtungen in kürzester Zeit ganz ungeordnet untereinander verteilen, auch wenn ihnen anfangs eine bevorzugte Startrichtung vorgegeben wird.



Andreas Ipp, Anton Rebhan
Institut für Theoretische Physik
Technische Universität Wien

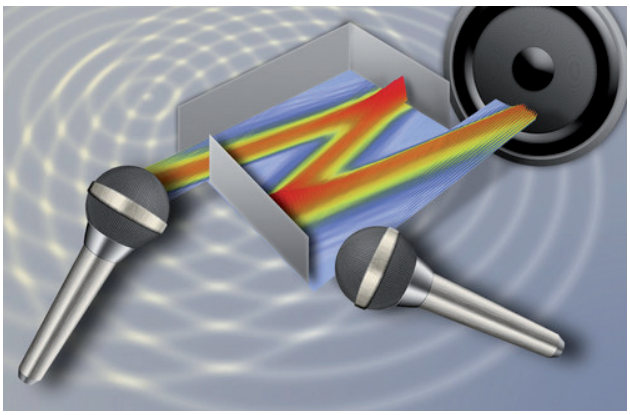
Wechselwirkung Laser – Materie

Einer der grundlegenden Prozesse bei Wechselwirkungen zwischen Lasern und Materie in starken Feldern ist die „above-barrier" Ionisation, ein Vorgang, den man sehr gut verstanden glaubte. Dabei wird vorausgesetzt, dass die „strong-field approximation" (SFA) im Bereich kleiner Keldysh Parameter (das ist das Verhältnis zwischen Ionisationspotential und pondermotiver Energie) gültig ist. Erwartet wurde, dass in diesem Bereich der Einfluss des atomaren Coulombpotentials als kleine Störung behandelt werden kann. Im Widerspruch zur Vorhersage der SFA wurde jedoch im Photoelektronen-Spektrum für kurze Laserpulse im mittleren Infrarotbereich eine unerwartete Struktur bei kleinen Energien gefunden. Diese Struktur wurde deshalb „ionization surprise" getauft. Die Ursache dafür haben wir die Phasenraum-Fokussierung der Elektrontrajektorien unter dem gemeinsamen Einfluss von Laser- und Coulombfeld identifiziert. Diese Fokussierung kann man sichtbar machen, indem man die Abbildung der Anfangszustände auf die Endzustände im Phasenraum als Funktion der Energie und des Drehimpulses darstellt (siehe Abbildung).



Christoph Lemell
Institut für Theoretische Physik
Technische Universität Wien

Die perfekte Welle

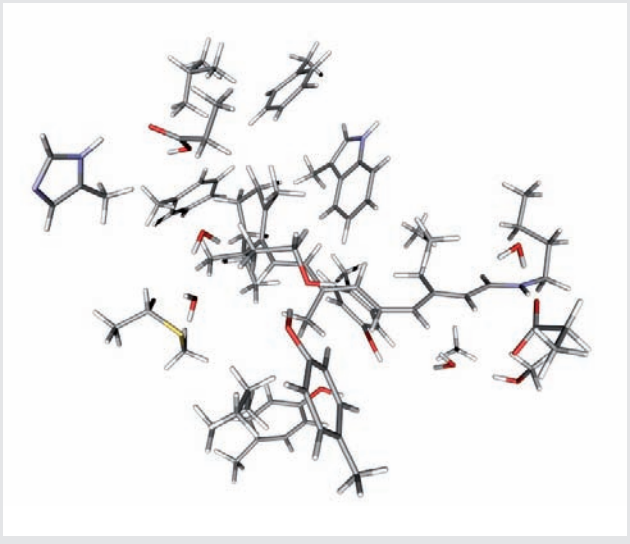


In diesem Projekt entwickelten wir eine Methode, Wellen verlustfrei auf präzise Bahnen zu schicken. So könnten etwa Schallwellen vorbei an unerwünschten Mithörern direkt zum Ziel gesendet werden.

Jemandem einen Ball zuwerfen, ohne dass er von anderen Leuten abgefangen werden kann, ist relativ einfach. Jemandem etwas zuzurufen, ohne dass es von anderen Leuten gehört werden kann, ist viel schwieriger. Hier gibt es einen grundlegenden Unterschied zwischen Wellen und festen Objekten: Während sich der Ball entlang einer geraden Linie bewegt, breiten sich Wellen meist in alle Richtungen gleichzeitig aus. Quantenphysiker der TU Wien stellen nun eine Methode vor, wie man Wellen dazu bringen kann, sich ebenfalls auf simplen, geraden Bahnen zu bewegen. Wendet man diese Idee auf Schallwellen an, könnte man etwa direkt mit einem Zuhörer am anderen Ende des Zimmers kommunizieren, ohne dass sonst jemand davon etwas hören kann. Veröffentlicht wurden diese Ideen nun im Fachjournal „Physical Review Letters".

Florian Libisch, Stefan Rotter
Institut für Theoretische Physik
Technische Universität Wien

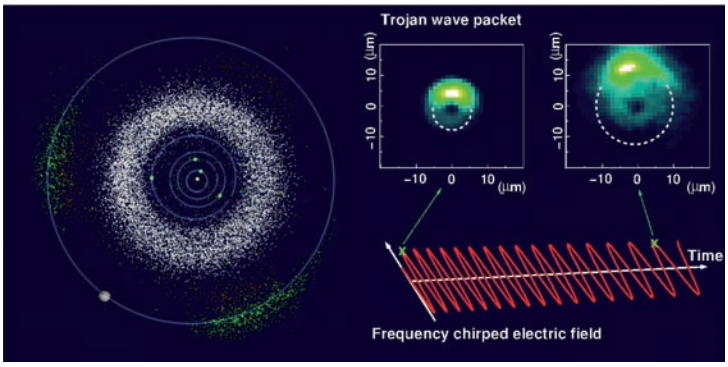
Modellierung photo-induzierter Phänomene



Das Verstehen der elektronischen Anregungen von großen vielatomigen Systemen ist ein Eckpfeiler für die Modellierung photo-induzierter Phänomene in der belebten Natur und in der Materialwissenschaft. Allerdings ist die Zuverlässigkeit von Rechenmethoden, die genutzt werden können, um von der elektronischen Struktur abhängige Eigenschaften modellieren zu können, begrenzt durch die Größe der untersuchten Systeme. Daher ist es heute wesentlich, Anstrengungen zur Entwicklung solcher Methoden zu unternehmen, die eine zuverlässigen Modellierung dieser Eigenschaften unter vernünftigem Rechenaufwand ermöglichen. Das Projekt bezweckt die Untersuchung der CNDOL Methode, die unter Anwendung einer angenäherten Hamilton-Funktion die elektronische Anregung großer Moleküle modelliert. Am VSC-2 übersetzter Quellcode wurde getestet hinsichtlich Parallelisierung und Zeit durch die Berechnung von Fulleren und Elektronenspektren von Dimeren.

Hans Mikosch,
Institut für Chemische Technologien und Analytik
Technische Universität Wien

Jupiters „Trojaner“ im Atom-Format



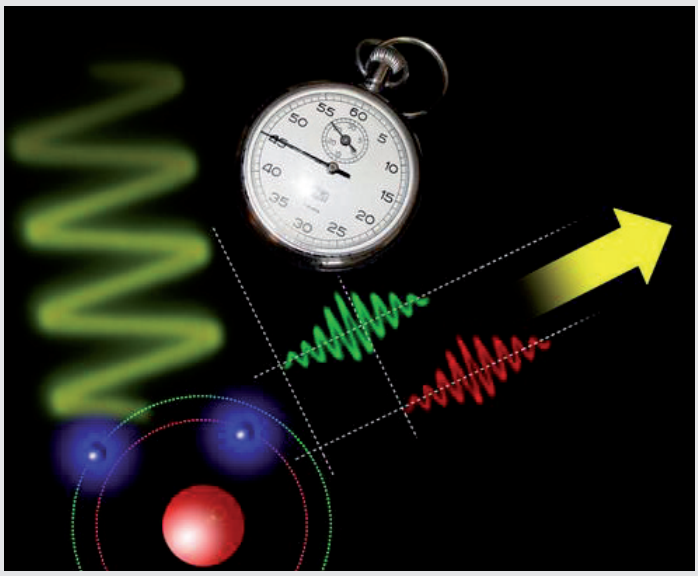
Shuhei Yoshida, Joachim Burgdörfer
Institut für Theoretische Physik
Technische Universität Wien

Vorhersagen die durch Berechnungen am Vienna Scientific Cluster gemacht wurden sind erfolgreich in Experimenten nachgewiesen worden: Ähnlich wie der Planet Jupiter Asteroiden auf stabilen Bahnen hält, lassen sich Elektronen in Kalium-Atomen durch elektromagnetische Felder stabilisieren.

Milliarden Jahre können Planeten und Asteroiden regelmäßig rund um die Sonne kreisen. Auch Elektronen, die sich rund um einen Atomkern bewegen, stellt man sich gerne wie Planeten im Mini-Format vor. In Wirklichkeit verhalten sich Atome aufgrund quantenphysikalischer Effekte aber doch ganz anders als Planetensysteme. Nun ist es einem US-amerikanisch-österreichischen Forschungsteam gelungen, Elektronen in Atomen lange Zeit stabil auf planetenartigen Bahnen kreisen zu lassen. Den entscheidenden Trick dafür hat man sich vom Jupiter abgeschaut: Er stabilisiert die Bahnen von Asteroiden – den sogenannten „Trojanern“ – und auf ganz ähnliche Weise konnten nun Elektronen-Bahnen rund um den Atomkern durch ein elektromagnetisches Feld stabilisiert werden. Die Forschungsergebnisse wurden nun im Fachjournal „Physical Review Letters“ publiziert.

Wechselwirkung von ultrakurzen Pulsen mit Materie

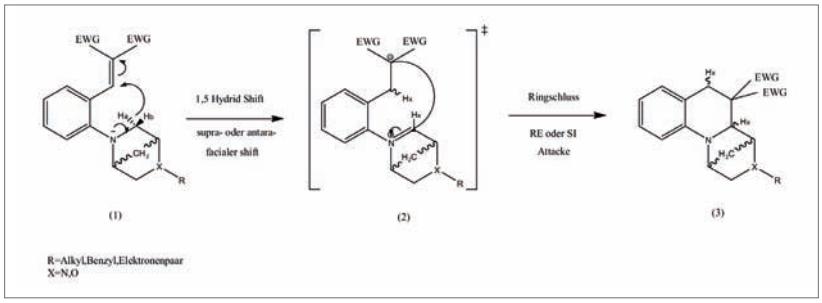
Mit dem Aufkommen von ultrakurzen Lichtpulsen, die nur wenige Attosekunden lang sind (eine Attosekunde entspricht 10^{-18} Sekunden, also dem Trillionstel einer Sekunde), wurde es möglich, elektronische Dynamik in Atomen und Molekülen auf ihrer natürlichen Zeitskala zu untersuchen. Das Ziel dieses Projektes ist es, mit Hilfe von quantenmechanischen Simulationen von Laser-Atom Wechselwirkungen, die mit solchen kurzen Pulsen nun experimentell zugängliche ultraschnelle Elektronendynamik in mikroskopischen Systemen besser zu verstehen. Zum Beispiel untersuchen wir zeitaufgelöste Photoionisation, also wie lange ein Elektron braucht, um ein Atom zu verlassen, nachdem es ein einzelnes Photon absorbiert hat.



Stefan Nagele, Renate Pazourek, Johannes Feist, Georg Wachter, Joachim Burgdörfer
Institut für Theoretische Physik
Technische Universität Wien

TRESPASS Projekt

Um den stereochemischen Charakter der T-Reaktion zu erörtern (siehe Abbildung), werden die möglichen Übergangszustände auf dem RMP2/6-311*g++ Niveau mit Gaussian09 berechnet. Zudem werden die Rechnungen, aufgrund des empirisch beobachteten Lösungsmitteleinflusses auf die Stereochemie, auch in flüssiger Phase durchgeführt (Polarizeable Continuum Model PCM). Um ein Energieprofil der Reaktionen zu erstellen, werden die Pfade der spezifischen Reaktionskoordinaten (IRC) berechnet.
Die Analyse der entsprechenden Ergebnisse erfolgt mittels der NBO Methode.

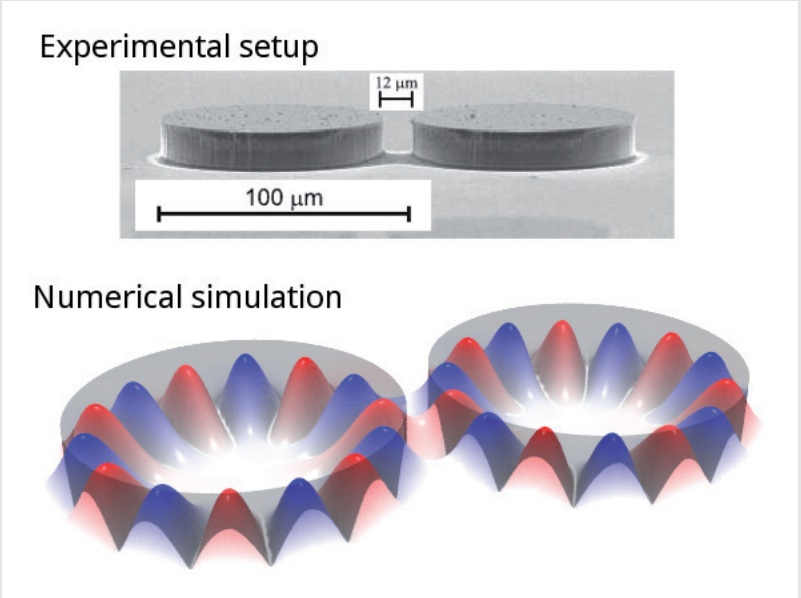


Die Abbildung zeigt eine Ringschlussreaktion unter dem Einfluss des tert-Amino-Effekts. Die gezeigte Synthesesequenz ermöglicht über ortho-bisubstituierten tert-Anilinen (1) den Zugang zu Hydrochinolinen (3) das von pharmazeutischem und biologischem Interesse ist . Die entsprechende Stereochemie kann über den bevorzugten Übergangszustand (2) erklärt werden.

Roman Nekola, Ulrich Jordis
Institut für Angewandte Synthesechemie
Technische Universität Wien

Mikro-Laser

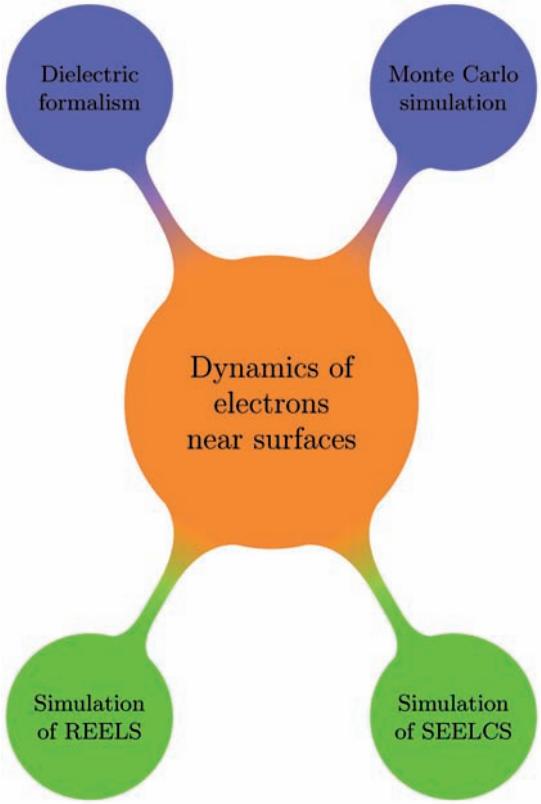
In unserer Forschung beschäftigen wir uns mit der Simulation von verschiedenen Mikro-Lasern wie sie am Institut für Photonik der TU-Wien hergestellt werden. Im Speziellen sind wir daran interessiert, wie solche Mikrolaser aneinander koppeln, wenn sie in unmittelbarer Nähe zueinander positioniert werden (sh. Abbildung). Nachdem unsere Simulationen numerisch sehr aufwendig sind, hängen sie sehr stark von der Verfügbarkeit eines Großrechners wie dem VSC ab. Die rechnerischen Ressourcen des VSC bieten uns die nötige Flexibilität, um eine ganze Reihe verschiedener Laser-Strukturen zu untersuchen und zielgerichtet an deren Optimierung zu arbeiten.



Stefan Rotter, Matthias Liertzer
Institut für Theoretische Physik
Technische Universität Wien

Elektronen in Festkörpern

Ziel dieses Projekts ist es, Rechenleistung für die Untersuchung der Wechselwirkung zwischen Elektronen und Festkörpern zur Verfügung zu stellen. Es werden intensive Monte-Carlo Berechnungen am Vienna Scientific Cluster durchgeführt um (1) den Effekt von Oberflächenanregungen in Elektronen-Rückstreuexperimenten zu untersuchen und (2) die Interpretation von neuen Elektronenkoinzidenzexperimenten zu untermauern [W.S.M. Werner et al, Appl. Phys. Lett 99 184102, 2011], wobei das Spektrum von emittierten Sekundärelektronen im Laufe eines Plasmonenzerfalls in Aluminium gemessen wurde.

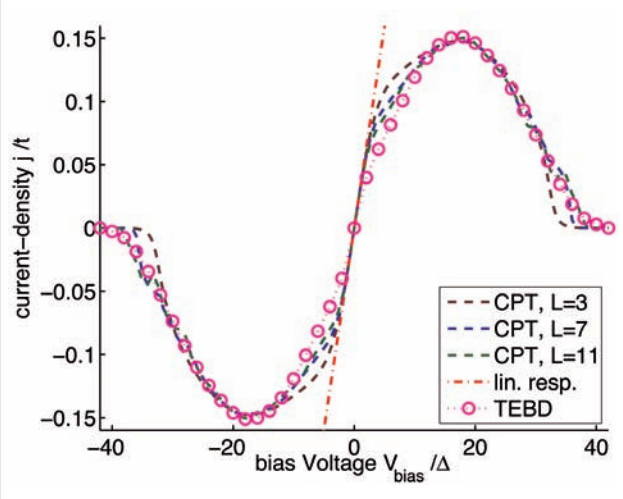


Francesc Salvat Pujol, Wolfgang Werner
Institut für Angewandte Physik
Technische Universität Wien

Stark korrelierte Quanten-Vielteilchensysteme im Nichtgleichgewicht

Das theoretische Verständnis von stark korrelierten, quantenmechanischen Vielteilchensystemen stellt ein nur unvollständig verstandenes, sehr anspruchsvolles, Problem dar, welches in letzter Zeit immer relevanter für Experimente und Technologie im Bereich der molekularen- und nano-Elektronik sowie der Spintronik und bei quanten-optischen Versuchen wird.

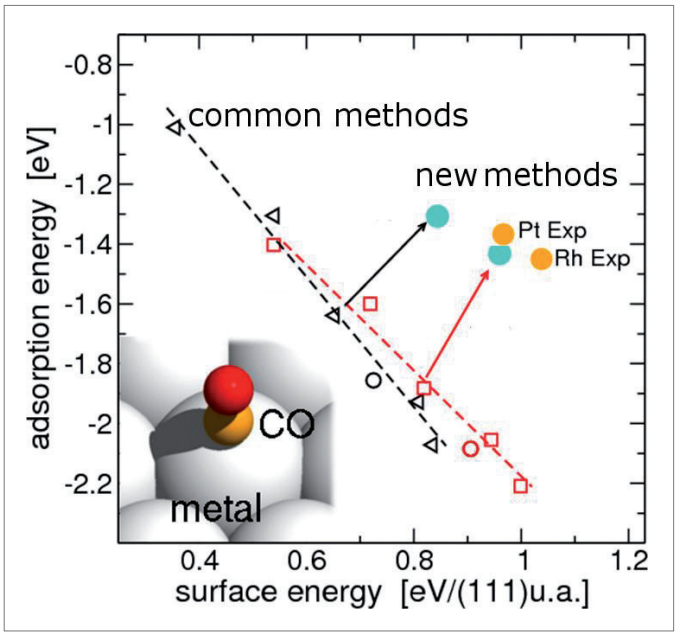
Wir entwickeln numerische Methoden um Modelle solcher Systeme in Nichtgleichgewichtssituationen zu untersuchen: die Nichtgleichgewichts-Cluster-Störungsrechnung und den Nichtgleichgewichts-Variationellen-Cluster-Zugang. Stationäre Größen für ein Modell eines Quantenpunktes – das ein Störstellen-Anderson-Modell – werden berechnet. Cluster Methoden werden mit Resultaten einer quasi-exakten Zeitentwicklung durch Dichtematrix Renormierungs Gruppe + Time Evolving Block Decimation verglichen.



Martin Nuss, Wolfgang von der Linden, Enrico Arrigoni, Hans Gerd Evertz, Martin Ganahl
Institut für Theoretische und Computergestützte Physik
Technische Universität Graz

Die Suche nach exakten Korrelationen in Festkörpern

Um Materialien auf atomarer Ebene zu modellieren, muss man üblicherweise die Schrödingergleichung lösen. Was dabei oft verschwiegen wird, ist, dass der Rechenaufwand für die Lösung exponentiell mit der Anzahl der beteiligten Partikel wächst. Das heißt, dass mit jeder neuen Generation von Supercomputern nur ein oder zwei Elektronen mehr behandelt werden können. In der Praxis werden daher Näherungsmethoden verwendet z.B. die nach dem in Österreich geborenen Nobelpreisträger Walter Kohn benannte Kohn-Sham Dichtefunktionaltheorie. Diese Näherungen können allerdings nicht systematisch verbessert werden. Mit dem vom FWF geförderten SFB ViCoM wollen wir Näherungen für die Schrödingergleichung entwickeln, die systematisch verbessert werden können. Einige bahnbrechende neue Methoden wurden bereits implementiert und getestet.

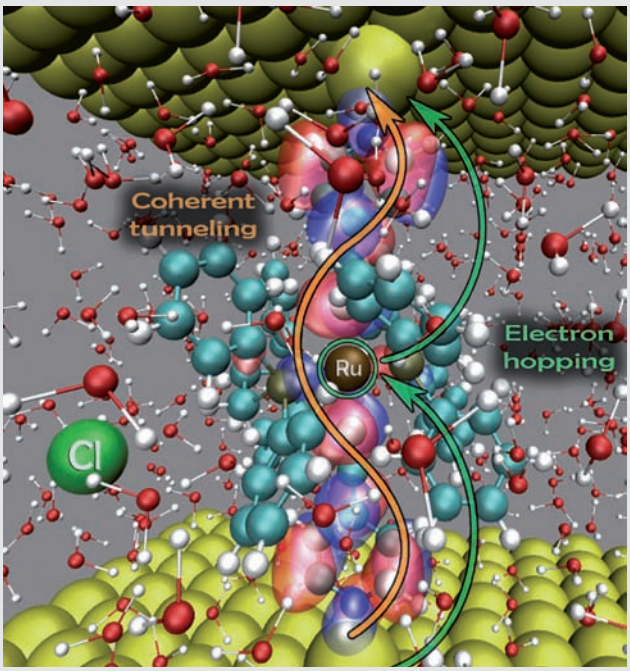


Die Abbildung zeigt, dass konventionelle Methoden große Fehler bei den Oberflächen- und Adsorptionsenergien ergeben. Die neu entwickelte Methode erlaubt eine exakte Behandlung von Oberflächenreaktionen, die für die Modellierung von Katalysatoren relevant sind.

Georg Kresse
Computergestützte Materialphysik
Universität Wien

Elektrochemischer Ladungstransport

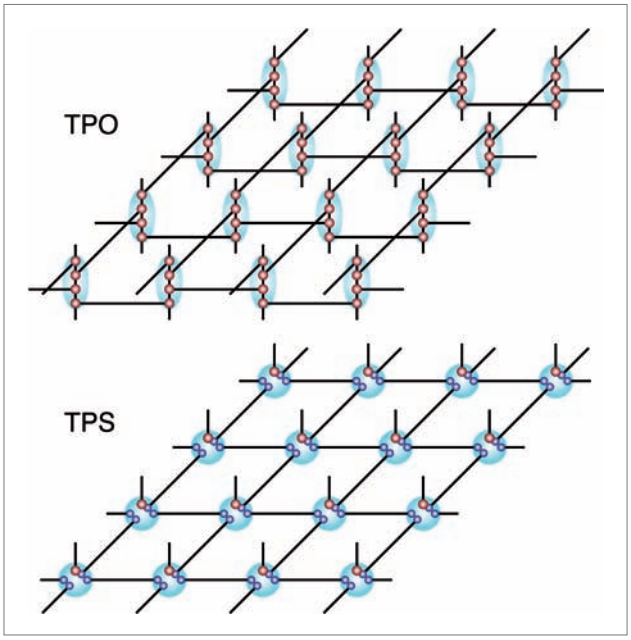
Ein elektrochemisches STM (Scanning Tunnelling Microscopy) ist eine innovative experimentelle Methode um den Elektronentransport durch einzelne Moleküle zwischen Metall-Elektroden zu charakterisieren. Es liefert in situ Information nicht nur über den Tunnelstrom, sondern auch über die kritische Spannung, die einen Übergang zwischen Redox Zuständen des Moleküls ermöglicht. Eine atomistische Interpretation solcher Experimente ist aber sehr schwierig und erfordert eine signifikante Hilfestellung durch Simulationsrechnungen auf Basis der Dichtefunktionaltheorie. Aus theoretischer Sicht müssen zwei Transportregime unterschieden werden, nämlich auf der einen Seite das der kohärenten Tunnel-Prozesse, bei denen das Elektron in einem Schritt das Molekül passiert, also ohne Relaxation der anderen Elektronen oder Atomkerne, und auf der anderen Seite das thermisch induzierte Elektronen Hopping.



Robert Stadler, Georg Kastlunger
Institut für Physikalische Chemie
Universität Wien

Frustrierte Magnete

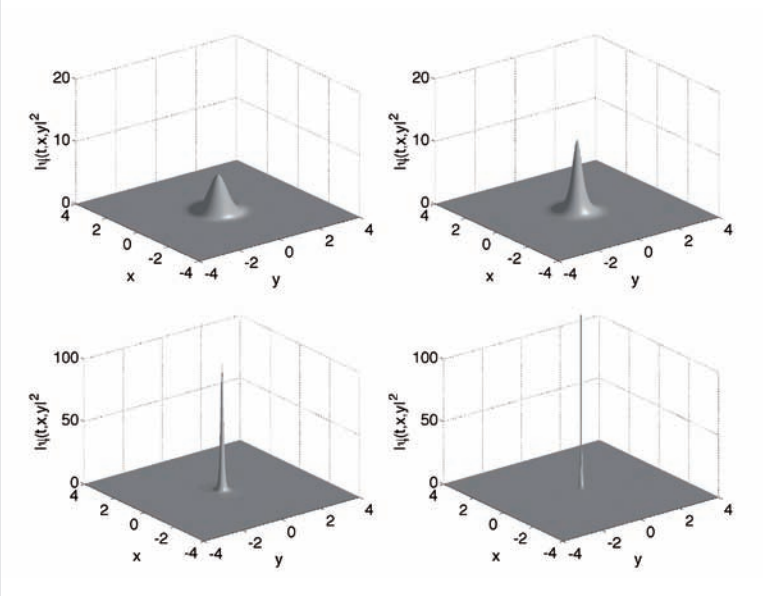
Frustrierte Magnete haben viele faszinierende Eigenschaften, wie zum Beispiel symmetriegeschützte, topologisch entartete Grundzustände oder Quasiteilchenanregungen mit fraktionaler Statistik. Wegen des Vorzeichenproblems erweist es sich jedoch oft als schwierig, solche Systeme mit Quanten-Monte-Carlo-Methoden zu untersuchen. Das aus der Quanteninformationstheorie stammende Konzept der Tensorproduktzustände (TPS) stellt einen allgemeinen Ansatz für Wellenfunktionen dar, um energetisch niedrige Eigenzustände von stark korrelierten elektronischen Vielteilchensystemen zu simulieren. Durch imaginäre Zeitentwicklung wird die Grundzustandswellenfunktion von frustrierten Magneten in TPS-Form heraus projiziert und ihre exotischen Eigenschaften mithilfe der Tensor-Renormierungsgruppen-Methode untersucht.



Frank Verstraete
Quantenoptik, Quantennanophysik und Quanteninformation
Universität Wien

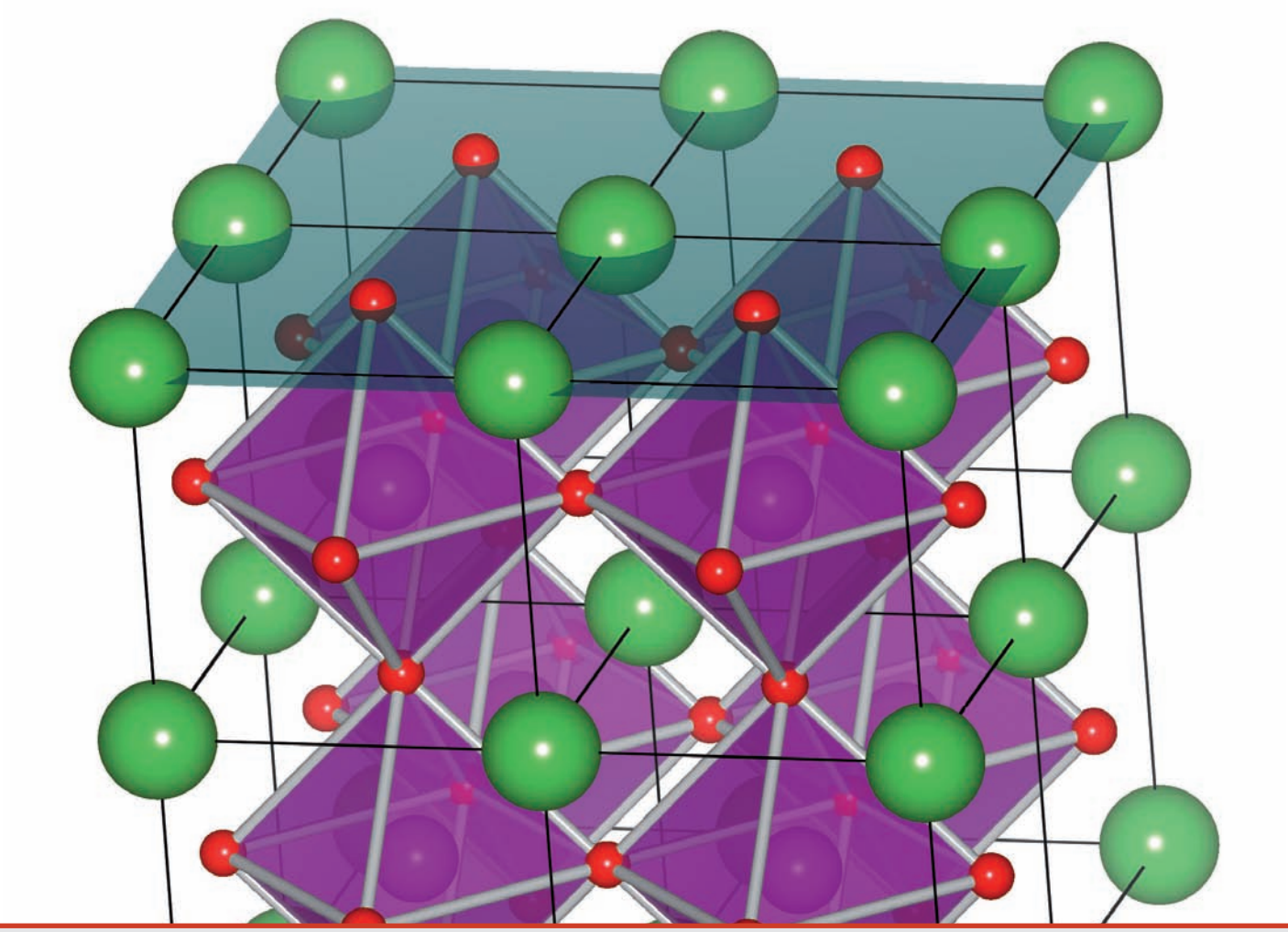
Nichtlineare Schrödingergleichungen

Ein System von zwei nichtlinearen Schrödingergleichungen wird untersucht. Die Gleichungen sind durch kubische Terme und durch einen linearen Term gekoppelt. Der lineare Term, durch die Rabi Frequenz beschrieben, modelliert ein extern betriebenes Außenfeld. Das System modelliert zwei Komponenten eines Bose-Einstein Kondensats in einem harmonischen Potential. Unter passenden Bedingungen und in dem Fall einer fokussierenden Nichtlinearität wird die Lösung unendlich nach endlicher Zeit (finite-time blow-up). Numerische Simulationen in einer und zwei Dimensionen überprüfen und bestätigen die erhaltenen theoretischen Ergebnisse. Es stellt sich dabei heraus, dass die Rabi Frequenz verwendet werden kann, um den Massentransport zwischen den zwei Komponenten zu kontrollieren und um daher das „Blow-up“ Verhalten zu beeinflussen.



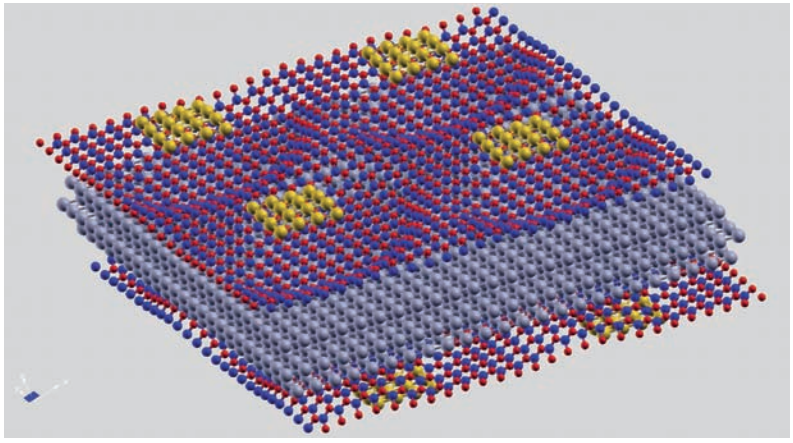
Rada Maria Weishäupl
Institut für Mathematik
Universität Wien

Materialwissenschaften



Katalyse mittels Gold Nano-Partikeln auf dem Rh-BN Nanomesh

Wir berechnen die elektronische Struktur und verschiedene damit zusammenhängende Eigenschaften von Festkörpern mittels unseres Programms WIEN2k, welches von mehr als 2000 Gruppen weltweit lizenziert ist. Die untersuchten Materialien können Kristalle, Oberflächen, Interfaces oder Nanostrukturen mit speziellen Eigenschaften sein. Vor kurzem konnten wir die Struktur des BN/Rh(111) „Nanomeshes" lösen und seine Funktionalität bei der Absorption von Molekülen oder metallischen Clustern erklären. Diese Nanostruktur hat eine Periodizität von 3.2 nm und die Simulation erfordert Elementarzellen mit mehr als 1100 Atomen. Das kann nur auf modernen Supercomputern mit mehr als 500 cores behandelt werden und braucht dennoch einige Wochen an Rechenzeit.

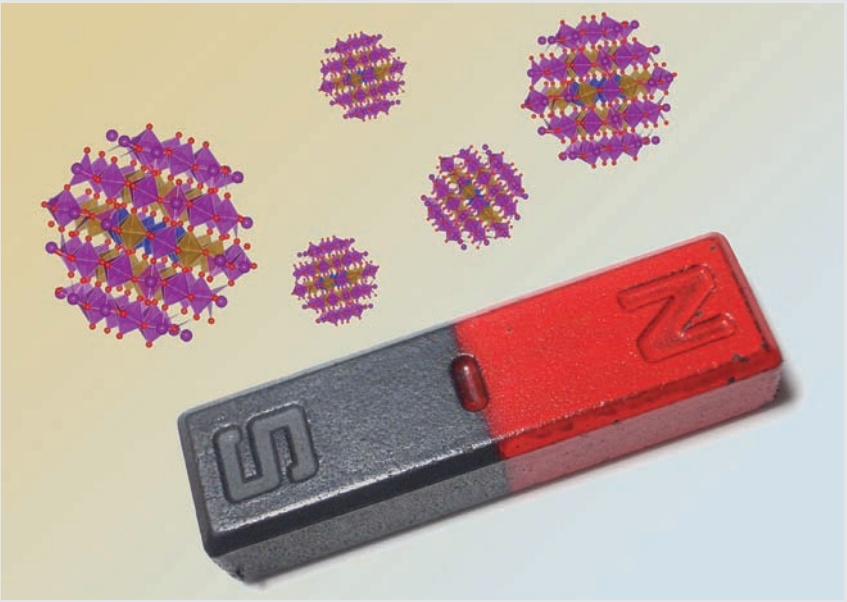


Die Abbildung zeigt fixierte Au Cluster in den Poren des BN/Rh(111) Nanomeshes

Peter Blaha
Institut für Materialchemie
Technische Universität Wien

Großes Staunen über kleine Kristalle

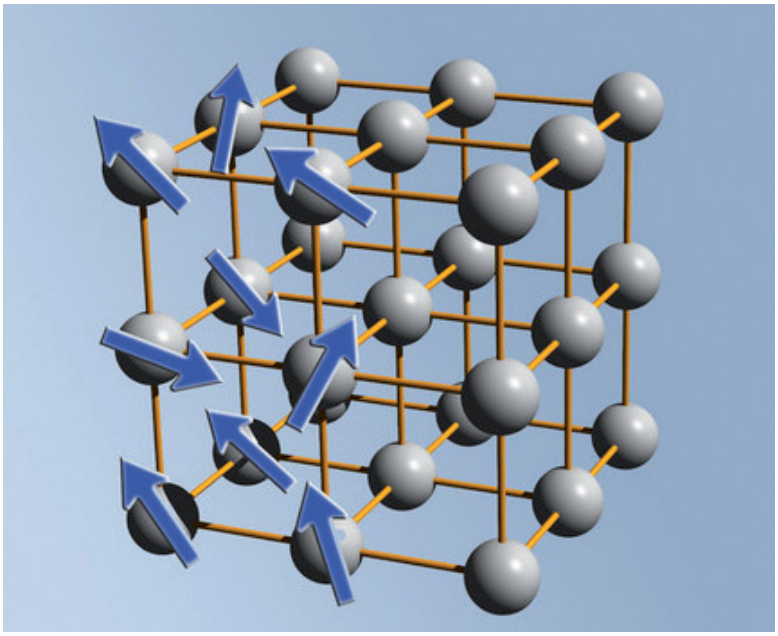
Winzige Kristalle verblüffen mit unerwarteten Eigenschaften – Forschungsteams der TU Wien und des indischen S.N. Bose National Centre in Kolkata erklären nun warum.
Ein kleines Stück Eisendraht ist magnetisch – genau wie eine große Eisenstange. Auf die Größe kommt es bei Materialeigenschaften normalerweise nicht an. Überraschenderweise entdeckte man nun aber in einem österreichisch-indischen Forschungsprojekt (MONAMI), dass bestimmte Materialien plötzlich ganz ungewohnte Eigenschaften zeigen, wenn man sie in Form winziger Kristalle untersucht. Das soll in Zukunft zu Werkstoffen mit maßgeschneiderten elektrischen und magnetischen Eigenschaften führen.



Angelo Valli, Karsten Held
Institut für Festkörperphysik
Technische Universität Wien

Das Elektron ist ein Rudeltier

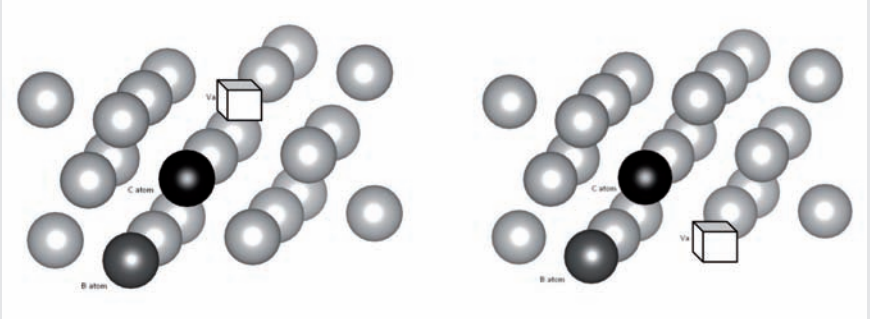
Materialeigenschaften werden oft von Elektronen-Korrelationen bestimmt. Am Institut für Festkörperphysik untersucht man das mit neuen Rechenmethoden.
Wenn jetzt im Winter die Straßen frieren oder wenn der Glühwein aus heißen Häferln dampft, dann haben wir es mit Phasenübergängen zu tun: Eine Substanz wechselt von einem Zustand in einen anderen – etwa von flüssig zu fest oder gasförmig. In der Festkörperphysik sind aber auch ganz andere Arten von Phasenübergängen wichtig, zum Beispiel Übergänge zwischen magnetischen und nichtmagnetischen Zuständen, bei denen sich viele Elektronen gegenseitig beeinflussen. An der TU Wien wurde nun eine neue Methode entwickelt, um spezielle Phasenübergänge quantenmechanisch zu beschreiben. Es wurde im Fachjournal „Physical Review Letters“ veröffentlicht.



Alessandro Toschi, Georg Rohringer
Institut für Festkörperphysik
Technische Universität Wien

Ab initio Simulationen von Leerstellen-Fremdatom-Clustern in Al-Mg-Si Legierungen

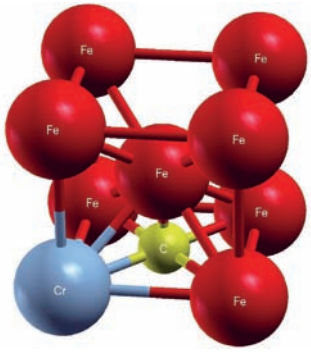
Die kohärente kfz (kubisch-flächen-zentriert) basierte Cluster Stabilität in Al-Mg-Si Legierungen wird mit Hilfe der auf der Dichtefunktionaltheorie beruhenden ab initio Methode VASP (Vienna Ab Initio Simulation Package) für eine sich periodisch wiederholende Superzelle mit 32 Atomen untersucht. Insbesondere das Vorhandensein von Leerstellen in der Struktur dieser Mg_a-Si_b-Vac Cluster wird im Detail untersucht. Eine Bindung von Leerstellen an solche kfz Komplexe von Fremdatomen wird vermutet.
Die Bindungsenergie zwischen zwei Substitutionsatomen, Mg und Si und verschiedene Anordnungen einer einzelnen Leerstelle um diese Co-Cluster in einer kfz Aluminium Matrix wird berechnet. Mit Hilfe dieser Energien können Formationen von sehr frühen Cluster-Leerstellen Komplexen vorhergesagt werden.



Peter Lang
Institut für Werkstoffwissenschaft und Werkstofftechnologie
Technische Universität Wien

Interstitielle Diffusion mit Trapping-Effekt

In der Werkstofftechnik spielt die Diffusion eine grundlegende Rolle, da die Geschwindigkeit vieler kinetischer Prozesse durch die Diffusion bestimmt wird. Folglich ist die Untersuchung des Diffusionsverhaltens von großer Bedeutung für viele technologischen Prozesse, wie etwa bei der Wärmebehandlung der Stähle, wo die interstitielle Diffusion von Kohlenstoff häufig die Phasenumwandlung bestimmt und somit auf die unterschiedlichen Gefügezustände der Stähle Einfluss nimmt.



Unter der atomistischen Diffusion in Metallen versteht man die thermisch aktivierte Bewegung der Atome im Kristallgitter. In Stahl erfolgt die Diffusion des Kohlenstoffs durch einen interstitiellen Diffusionsmechanismus. Die Kohlenstoff-Atome diffundieren hierbei im Eisen-Gitter über leere Zwischen-Gitterplätze, welche als Gitterlücken bezeichnet werden. In der krz- und kfz-Gitterstruktur des Eisens gibt es ausschließlich oktaedrische und tetraedrische Gitterlücken, wobei die oktaedrischen Gitterlücken energetisch begünstig sind.

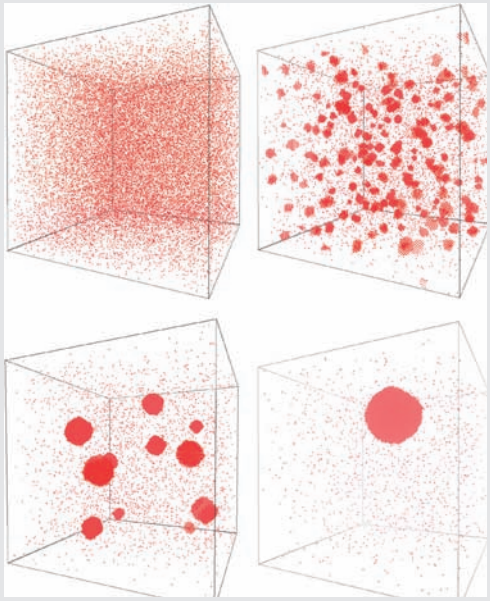
Zur Modellierung der interstitiellen Diffusion in Stählen ist es außerdem erforderlich, die Wechselwirkung zwischen den interstitiellen Atomen und den Gitterdefekten zu berücksichtigen. Experimentelle Untersuchungen haben vor einigen Jahrzehnten gezeigt, dass diese Wechselwirkung zu einem anomalen Verhalten der interstitiellen Diffusion führen kann. Im Fall einer anziehenden Wechselwirkung zwischen den interstitiellen Atomen und den Gitterdefekten kann diese Erscheinung durch den so genannten „Trapping-Effekt“ erklärt werden, bei welchem die Gitterdefekte Fallen für die diffundierenden interstitiellen Atome darstellen. Es existieren hierbei unterschiedliche Arten von Fallen für interstitielle Atome, welche nach dem Typ des Gitterdefektes eingeteilt werden können.

Die Abbildung zeigt die Kristallstruktur von krz-Fe mit einem substitutionell gelösten Chrom-Atom (Cr) und einem interstitiell gelösten Kohlenstoff-Atom (C) an einer benachbarten oktaedrischen Gitterlücke.

Markus Rath
Institut für Werkstoffwissenschaft und Werkstofftechnologie
Technische Universität Wien

Atomistische Beschreibung des Keimbildungsprozesses in Legierungen

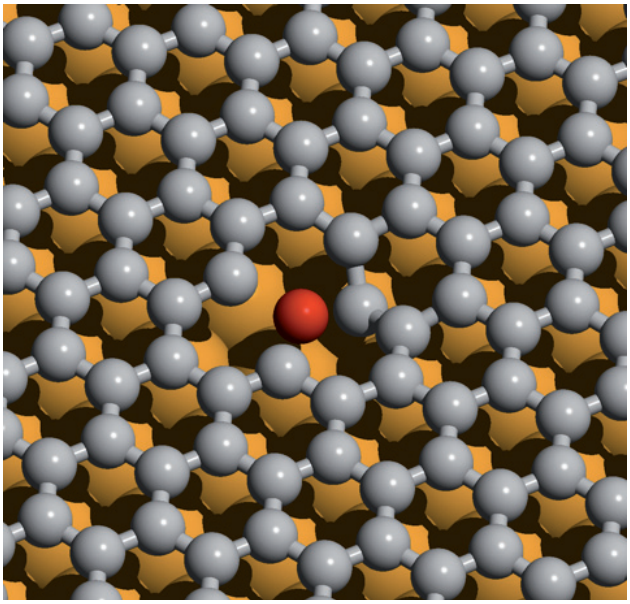
In technisch relevanten Werkstoffen wollen wir den Keimbildungsprozess von nanometer-großen Ausscheidungen beschreiben. Für diesen Größenbereich wird ein atomistischer Ansatz gewählt, der unter anderem exakte Bindungsenergien liefern kann, welche ausschließlich auf quantenmechanischen Beschreibungen basieren und ohne empirische Parameter bestimmt sind. Innerhalb der Dichtefunktionaltheorie sind solche Berechnungen mit hoher Präzision für Teilchen bis zu rund hundert Atomen möglich. Um Systeme mit einigen hunderttausend Atomen zu beschreiben, muss man allerdings auf Grund der Rechenintensität auf „weniger exakte“ Monte Carlo Simulationen übergehen. Unser Ziel ist es, Methoden zu untersuchen, wie die „exakten“ quantenmechanischen Ergebnisse effizient in Monte Carlo Simulationen eingebaut werden können.



Ernst Kozeschnik, Alice Redermeier, Piotr Warczok
Institut für Werkstoffwissenschaft und Werkstofftechnologie
Technische Universität Wien
in Zusammenarbeit mit
Raimund Podloucky, Tobias Kerscher, Martin Leitner, David Reith
Institut für Phyiskalische Chemie
Universität Wien

Projekt Spingraph

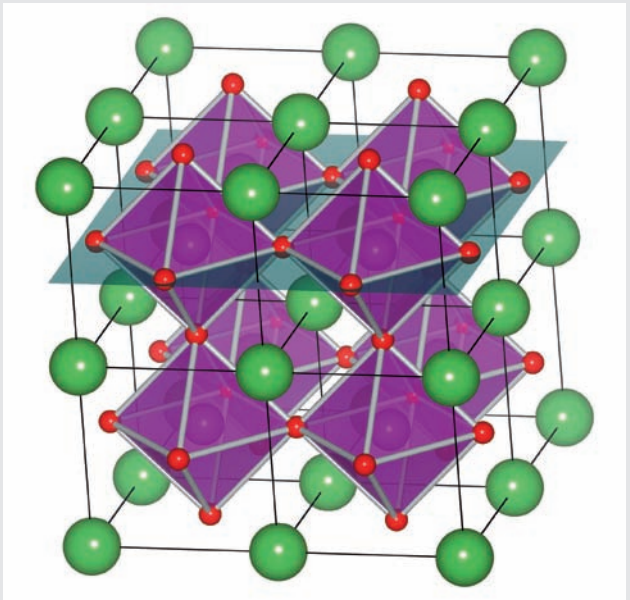
Die speziellen Eigenschaften von Graphen und seiner Wechselwirkung mit ferromagnetischen Metallen könnte einen gangbaren Weg aufzeigen um die Spin-Ströme für Anwendungen in der Spintronik zu manipulieren. Die starken Wechselwirkungen zwischen Graphen und dem Metall beeinträchtigen jedoch die gewünschten Eigenschaften. Eine Herausforderung liegt nun darin, eine maßgeschneiderte Grenzfläche zu erschaffen, welche die Wechselwirkung z.B. durch Einfügen eines weniger reaktiven (Edel) Metalls reduziert, aber trotzdem das notwendige Spin-Ungleichgewicht erhält. In diesem Projekt studieren wir diesen Wachstumsprozess (Interkalation) und seine Auswirkungen mittels Dichtefunktionaltheorie (DFT) parameterfrei auf atomarem Niveau.



Jörg Doppler, Andreas Garhofer, Florian Mittendorfer, Josef Redinger
Institut für Angewandte Physik
Technische Universität Wien

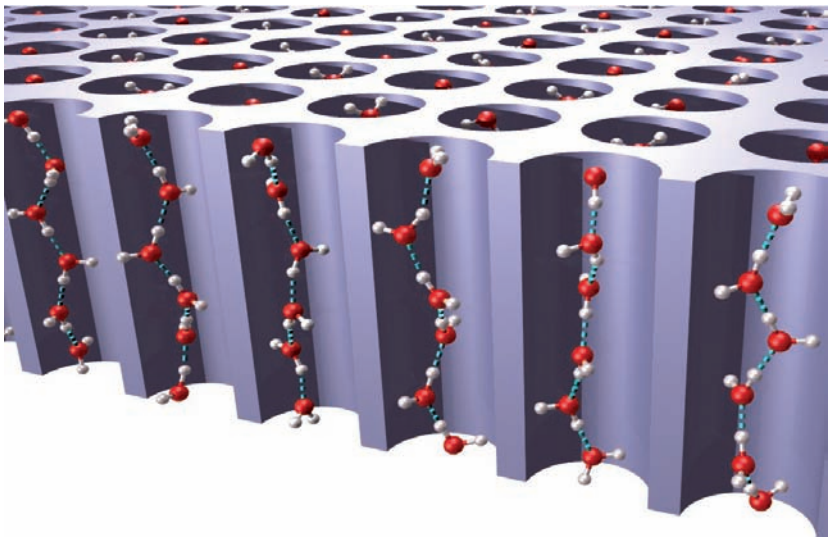
Projekt FOXSI

Perowskite haben in den letzten Jahren enorm an Attraktivität gewonnen, da sie eine Vielzahl von ungewöhnlichen Eigenschaften aufweisen. Zum Beispiel gehören Hochtemperatursupraleiter zu dieser Materialklasse, einige Perowskite weisen eine ungewöhnliche Kombination von Ferromagnetismus und Ferroelektrizität auf, andere zeigen so genannten „kolossalen“ Magnetwiderstand. Eine herausfordernde Aufgabe ist es, die verschiedenen Oberflächen der $A_{n+1}B_nO_{3n+1}$ artigen Verbindungen von Ruddlesden-Popper Typ zu studieren, die sich für $n\rightarrow\infty$ auf den ABO_3 Perowskit mit A=(Sr,La) und B=(Mn,Fe,Co,Ru) reduzieren. Detaillierte Rechnungen basierend auf Dichtefunktionaltheorie (DFT) und darüber hinaus sind notwendig, um die oftmals komplexen elektronischen und geometrischen Eigenschaften inklusive der Adsorption von kleinen Molekülen und der O_2 Dissoziation auf diesen Oberflächen ganz zu verstehen.



Marcel Hieckel, Wernfried Mayr-Schmölzer, Florian Mittendorfer, Raimund Podloucky, Josef Redinger
Institut für Angewandte Physik
Technische Universität Wien

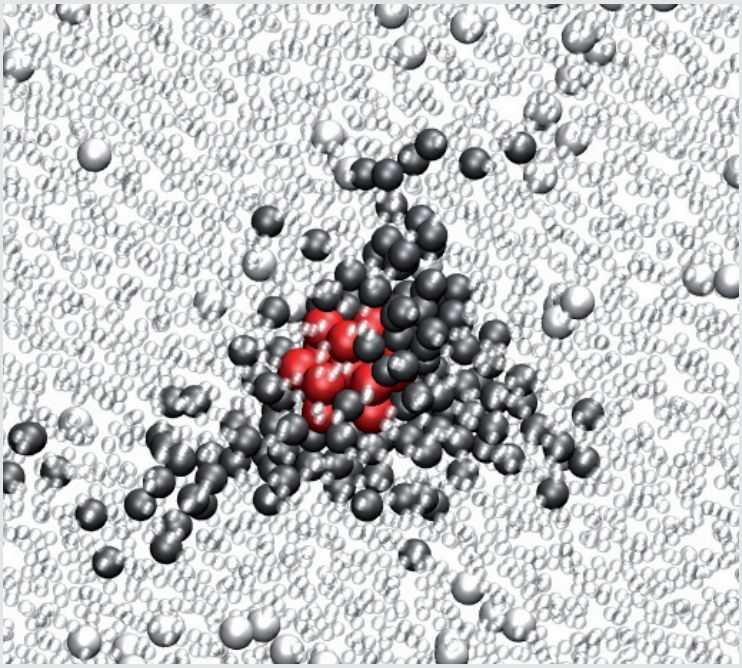
Wasser in Nanoporen



Füllt man Wasser in enge Poren mit Durchmesser im Nanometerbereich, bilden die Wassermoleküle eindimensionale Ketten, welche über makroskopische Distanzen geordnet sind. Diese Ordnung ist der Grund für die einzigartigen Eigenschaften von Wasser in Nanoporen, wie zum Beispiel eine große Empfindlichkeit auf äußere Felder, hohe Flussraten und ausgezeichnete Protonenleitfähigkeit. Technologisch können Membrane mit Nanoporen mit Hilfe von Kohlenstoffnanoröhren hergestellt werden und mögliche Anwendungen reichen von Filterungs- und Entsalzungsanlagen bis zu Wasserstoffbrennstoffzellen und Sensoren. In diesem Projekt benutzen wir molekulardynamische Simulationen, um die strukturellen und dynamischen Eigenschaften von Wasser in engen Poren zu untersuchen.

Georg Menzl, Christoph Dellago
Fakultät für Physik
Universität Wien

Kristallisation von unterkühlten Flüssigkeiten

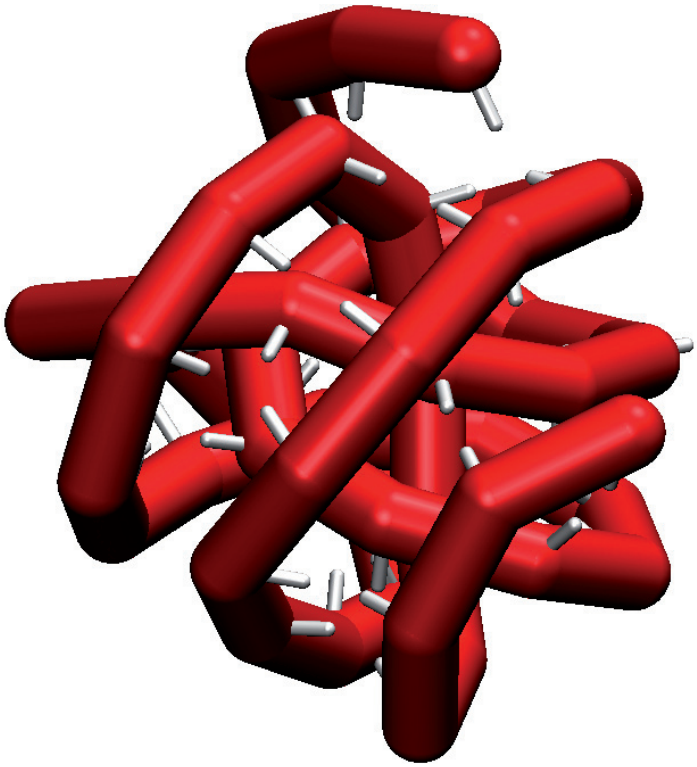


Für die gezielte Erzeugung kristalliner Materialien ist ein mikroskopisches Verständnis des Kristallisationsprozesses von großer Bedeutung. Da aber spontane Kristallisation auf der atomaren Zeitskala ein seltenes Ereignis ist, welches jedoch extrem schnell abläuft, sobald der Vorgang beginnt, ist es sowohl experimentell als auch durch Computersimulation schwierig, detaillierte Kenntnisse über diesen Prozess zu erlangen. In diesem Projekt benutzen wir speziell entwickelte molekulare Simulationsalgorithmen, um den Mechanismus der Kristallbildung aus der unterkühlten Flüssigkeit zu untersuchen. Ein überraschendes Ergebnis unserer Berechnungen ist, dass die Einbringung selbst kleinster kristalliner Keime die Kristallisationsrate stark beeinflusst, sodass sich dadurch die Möglichkeit zur Steuerung der Kristallisation bietet.

Swetlana Jungblut, Christoph Dellago
Fakultät für Physik
Universität Wien

Entwicklung selbstorganisierender Materialien

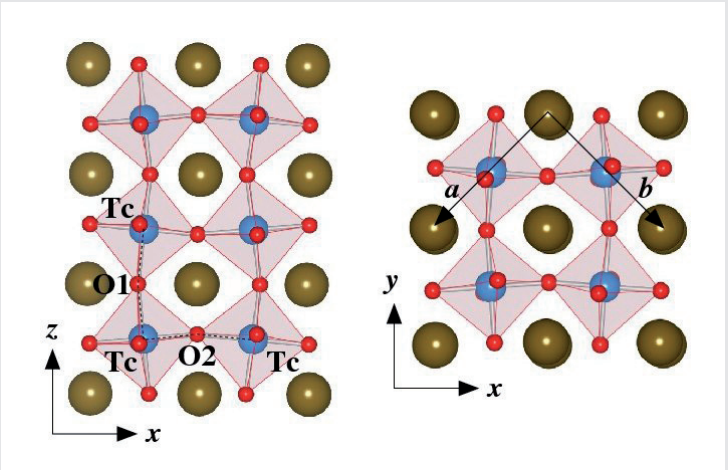
Selbstorganisierende Substanzen zeichnen sich dadurch aus, dass sie spontan wohldefinierte, langlebige Strukturen bilden. Solche Objekte können als Bausteine für komplexe Strukturen dienen, wie wir es bei natürlichen Proteinen beobachten können. In den Materialwissenschaften ist die Entwicklung von Materialien, welche von selbst spezifische Muster und Strukturen bilden, jedoch noch eine große Herausforderung. In diesem Projekt verfolgen wir einen biologisch inspirierten Zugang, um Ketten aus kolloidalen Teilchen zu entwickeln, welche sich zu komplexen Formen falten. Mit Hilfe aufwändiger Monte Carlo Simulationen konnten wir zeigen, dass es machbar ist, solche Kolloidketten zu entwerfen und damit eine Möglichkeit zur Erzeugung neuer Materialien zu schaffen.



Ivan Coluzza, Christoph Dellago
Fakultät für Physik
Universität Wien

Das ATHENA Projekt – Außergewöhnlich starker Magnetismus in $RTcO_3$ Perovskiten

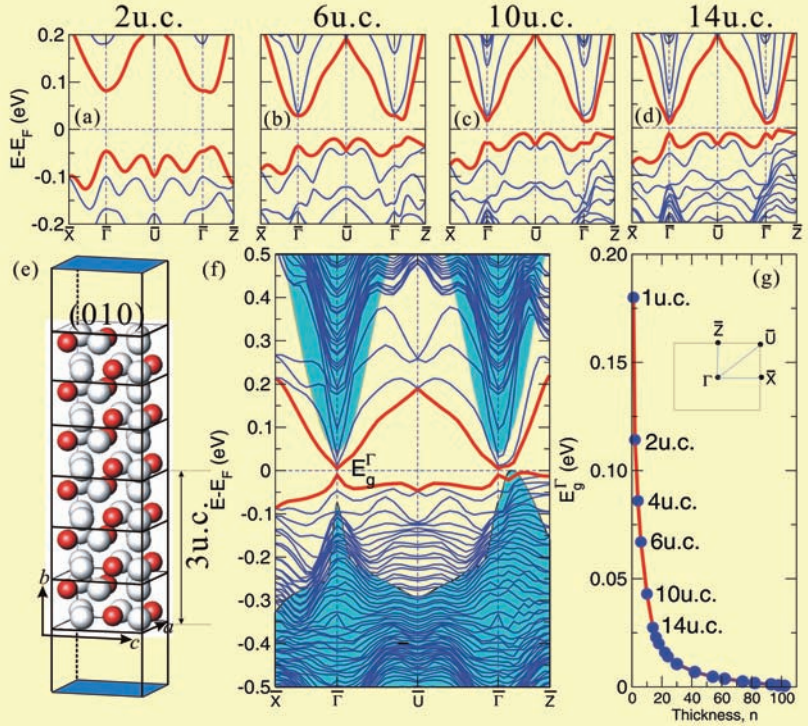
Im Rahmen dieses Projekts wird mit Hilfe von Hybrid-Dichtefunktional Theroie und Monte Carlo Simulationen die Evolution jener Temperatur, bei der magnetische Ordnung eintritt (Neel-Temperatur), in Perovskiten vom Typ $RTcO_3$ (wobei R=Calcium, Strontium, oder Barium sein kann) untersucht. Von besonderem Interesse ist die Abhängigkeit der Neel-Temperatur von deren elektronischen und strukturellen Eigenschaften. Die Materialien sind im Grundzustand Isolatoren, bilden einen starken Antiferromagnetismus aus und man beobachtet außergewöhnlich hohe Neel-Temperaturen, die zwischen 750 und 1200 Kelvin (477 – 927 Grad Celsius) liegen.
Die Neel-Temperatur steigt dabei linear mit der Größe des Ionenradius der Elemente Kalcium, Strontium und Barium an. Die Grafik zeigt exemplarisch eine deformierte $RTcO_3$ Struktur.



Jiangang He, XingQiu Chen, Cesare Franchini
Computergestützte Materialphysik
Universität Wien

Entdeckung neuartiger topologischer Isolatoren

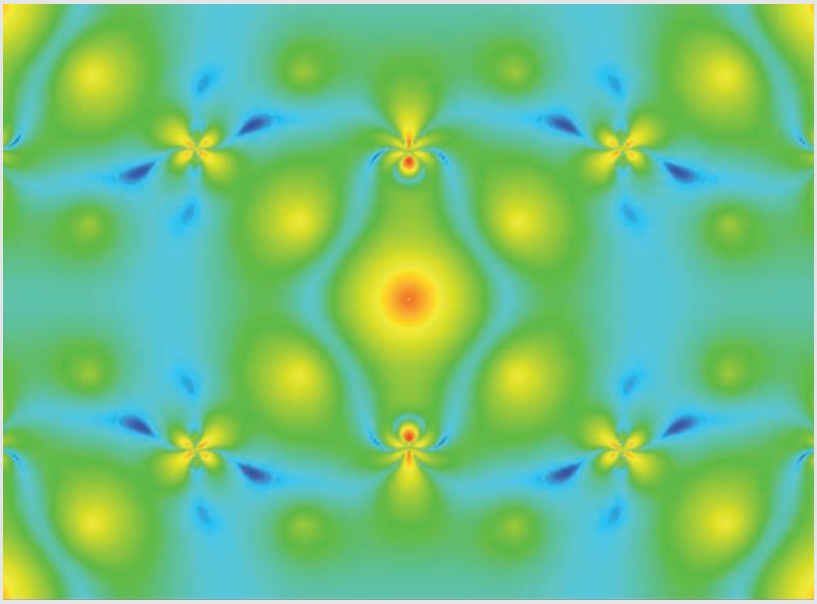
Topologische Isolatoren sind Materialien, die sich in ihrem Inneren wie ein elektrischer Isolator verhalten, aber an ihrer Oberfläche Leitfähigkeit besitzen. Das genaue Verhalten hängt von der Topologie des Materials ab und das Interesse an dieser Art von Isolatoren hat in den letzten Jahren stark zugenommen. Im Rahmen des Projekts MINGOX, einer Kooperation zwischen der Universität Wien und der Chinesischen Akademie der Wissenschaften, entdeckten wir eine solche topologische Phase in den binären Zintl Verbindungen Sr_2Pb und Sr_2Sn. In dem nicht-trivialen Zustand der topologischen Isolation entstehen metallische Zustände an der $Sr_2Pb(010)$ Oberfläche bei Filmdicken von etwa 100nm.



XingQiu Chen, Cesare Franchini
Computergestützte Materialphysik
Universität Wien

Das Lutetium-Wasserstoff-System

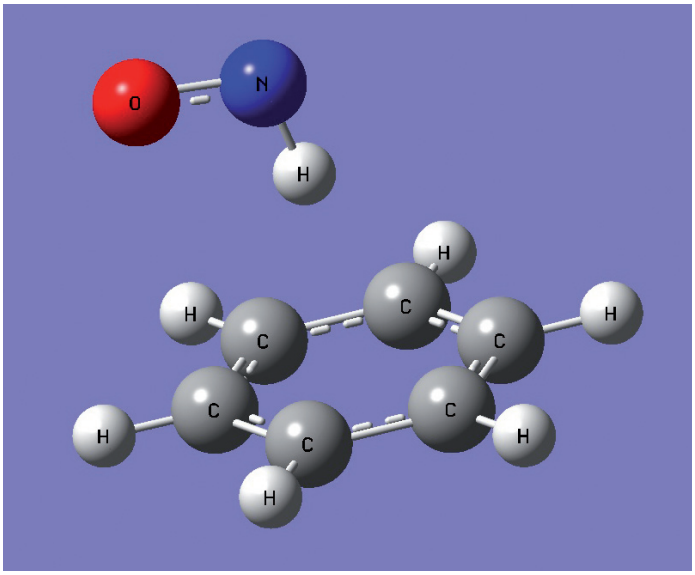
In diesem Projekt wird das Lutetium-Wasserstoff-System zum ersten Mal mit Hilfe von First-principles-Berechnungen untersucht. Dadurch soll ein detaillierteres Verständnis der Strukturen der einzelnen Phasen sowie, je nach Zusammensetzung, die bevorzugten Wasserstoff- bzw. Leerstellenanordnungen erzielt werden. Es werden große Superzellen verwendet, um die elektronischen, energetischen, strukturellen und elastischen Eigenschaften der stöchiometrischen und nichtstöchiometrischen Hydride zu untersuchen und Vergleiche mit ähnlichen Berechnungen für die Hydride der Seltenerdmetalle Sc, Y und La durchzuführen. Die Trends dieser Berechnungen sollten in gewissen Ausmaße auch Gültigkeit für die anderen Seltenerdmetall-Hydride haben.



Peter Herzig,
Institut für Physikalische Chemie
Universität Wien

Ab initio und Dichtefunktionalrechnungen an „blue-shifting" Wasserstoffbrücken

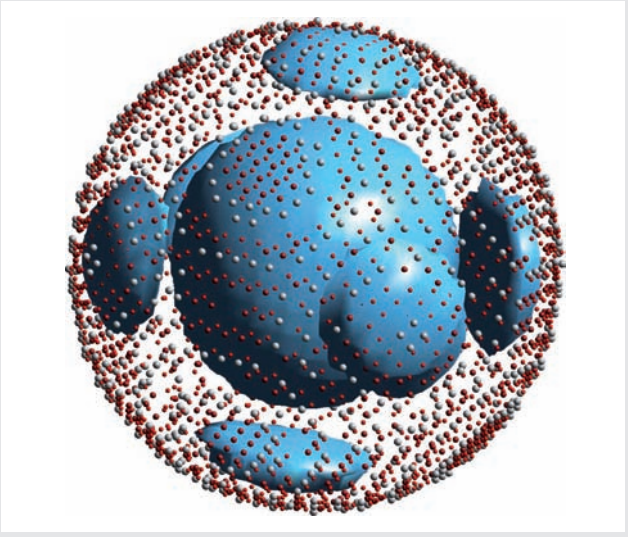
Die spektroskopisch beobachtbaren Eigenschaften von konventionellen A-H----B Wasserstoffbrücken sind qualitativ gut verstanden: kurze intermolekulare Abstände, Rotverschiebungen der A-H Streckfrequenzen und erhöhte Infrarotintensitäten. Hingegen treten im Fall der blue-shifting Wasserstoffbrücken einige der typischen Eigenschaften der konventionellen A-H---B Wasserstoffbrücken, mit umgekehrtem Vorzeichen auf, insbesondere bei A-H Bindungslängen und Schwingungsfrequenzen. A-H Bindungen werden kontrahiert und die Frequenzen der A-H Streckschwingungen sind blau-verschoben. Zahlreiche intermolekulare Komplexe mit blue-shifting Wasserstoffbrücken wurden mit aufwendigen quantenchemischen Methoden berechnet. In allen Fällen konnte gezeigt werden, dass die Präsenz einer negativen intramolekularen Kopplung zwischen vicinalen Bindungen in den Monomeren der wahre Grund für das Auftreten der Blau-Verschiebung ist.



Alfred Karpfen
Institut für Theoretische Chemie
Universität Wien

Ab initio Beschreibung von Nanostrukturen

Nanostrukturen mit Infrarotaktivität spielen eine kritische Rolle in Wissenschaft und Technik, weil viele Substanzen (Giftgase, Drogen, Explosiva) durch ihren Fingerabdruck im infraroten Bereich (2-20 μm) nachgewiesen werden können. Leider gibt es derzeit keine leistungsfähigen Laser und IR-Detektoren für diese Wellenlängen. Im Rahmen des SFB IR-On (FWF) werden theoretische Erkenntnisse genutzt, um die Entwicklung derartiger Laser und Detektoren zu leiten und unterstützen. Zu diesem Zweck entwickeln wir neue ab-initio Methoden, die auf Nanostrukturen angewendet werden können. Diese Methoden wurden bereits erfolgreich auf Systeme mit bis zu einer Million Atomen angewendet. Die Abbildung zeigt die Elektronendichte eines elektronischen Zustandes eines in einer AlAs Matrix eingebetteten GaAs Quantenpunktes und illustriert die Möglichkeiten der neu entwickelten Methode.

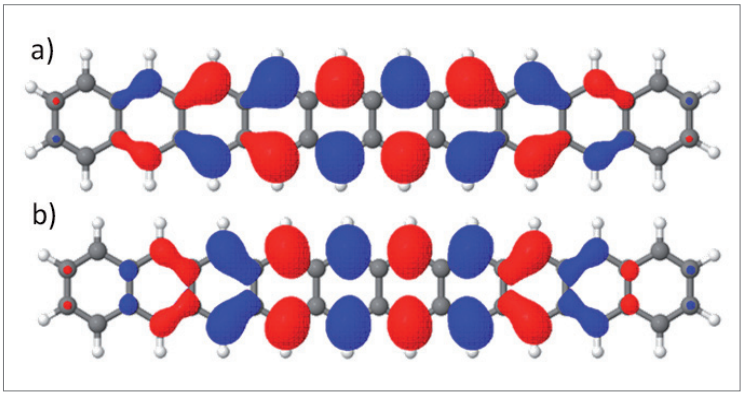


Die Abbildung zeigt die Elektronendichte eines Zustandes in einem in einer AlAs-Matrix eingebetteten GaAs Quantenpunkts (die Atome sind als kleine Punkte dargestellt; nur die Atome, die an der Oberfläche des Quantenpunkts liegen, sind gezeigt). Derartige Zustände können verwendet werden, um Licht zu ernten oder einen Quantencomputer zu realisieren.

Georg Kresse
Computergestützte Materialphysik
Universität Wien

Methoden für „Embedded Clusters" und nichtadiabatische Prozesse in Physik und Chemie

Seit der ersten experimentellen Realisierung von Graphen haben Graphen Nanobausteine eine zentrale Stellung in der Erforschung von zukünftigen Nanotechnologien eingenommen. Die lange Spinlebensdauer und Kohärenzzeit von Graphen macht es zu einem vielversprechenden Kandidaten für Spintronic und Quantenrechner Einheiten. Unsere jüngsten quantenchemischen Rechnungen wurden in Hinblick auf den erstaunlichen Multiradikalcharakter von Graphenflocken ausgeführt. Die aufwendigen Multireferenzrechnungen, die mit Hilfe des COLUMBUS Programmpaketes ausgeführt wurden, zeigten zweifelsfrei die Kaskade von Radikalcharakter (siehe die Abbildung), der sich innerhalb der Serie der Oligoazene ausbildet. Diese Rechnungen stellen den ersten Schritt zu einer umfassenden und theoretisch fundierten Modellierung von Graphendefekten dar.



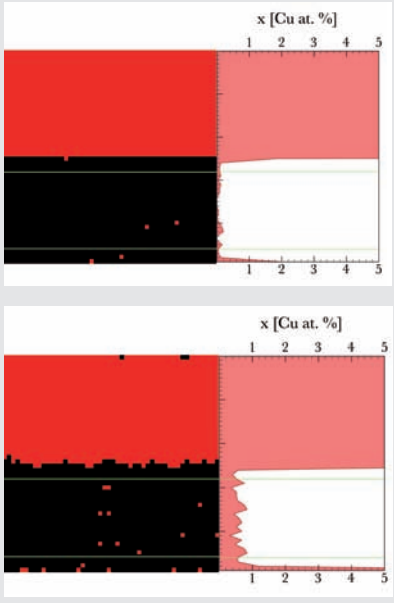
Die Abbildung zeigt das quasi-entartete a) höchste besetzte und b) niedrigste unbesetzte Orbital von Deka-Azen.

Hans Lischka
Institut für Theoretische Chemie
Universität Wien

Materialwissenschaften und Schrödingergleichung: Löslichkeit von Kupfer in Eisen

Materialeigenschaften werden von den quantenmechanischen Wechselwirkungen der Atome bestimmt, wie sie von der Schrödingergleichung beschrieben und erfolgreich mit Hilfe der Dichtefunktionaltheorie (DFT) berechnet werden. Die Kombination eines leistungsfähigen DFT Codes mit dem Konzept der Cluster Expansion (CE) und Monte Carlo (MC) Simulationen ermöglicht die thermodynamische Modellierung von großen Systemen mit 10^6 bis 10^9 Atomen, wobei DFT Genauigkeit beibehalten werden kann.

Die Abbildungen zeigen das Resultat einer solchen kombinierten Modellierung und demonstrieren in dramatischer Weise, dass Schwingungsenergien sehr stark die Löslichkeit von Kupfer in Eisen erhöhen, wie es von den Konzentrationsprofilen gezeigt wird. Es wird die Löslichkeit von Kupfer (rot) in Eisen (schwarz) für eine $Fe_{1-x}Cu_x$ Legierung gezeigt. DFT & CE & MC Simulationen bei T=1050K ohne (Abbildung oben) und mit (Abbildung unten) Schwingungsenergien. Die so berechnete Löslichkeit stimmt mit der technologischen Erfahrung überein, wie sie beim Härten von Stahl gewonnen wurde.



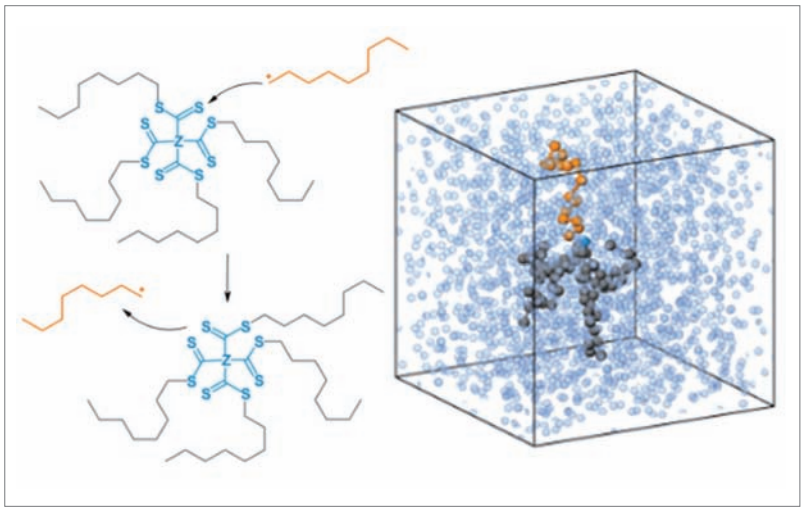
Das Projekt wurde vom FWF innerhalb des SFB VICOM, Projektnr. F41, gefördert.

David Reith, Raimund Podloucky, Markus Stöhr
Center for Computational Materials Science
Universität Wien

Tobias Kerscher, Stefan Müller
Keramische Hochleistungswerkstoffe
Technische Universität Hamburg-Harburg

Eigenschaften von sternförmig verknüpften (Co)polymeren

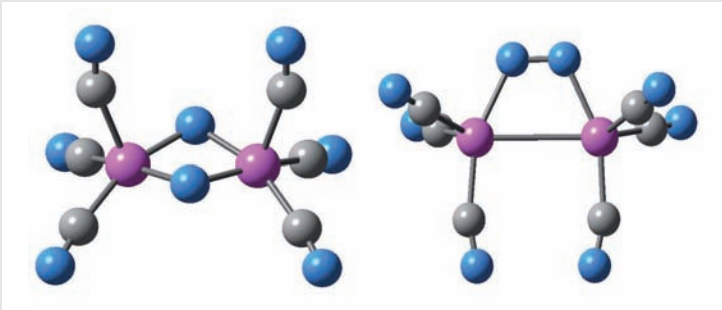
Inhalt des Projekts ist eine systematische Untersuchung von Größe, Gestalt und Orientierung von sternförmig verknüpften Polymermolekülen in Abhängigkeit von der Zahl der Arme, Länge der Arme, und Qualität des Lösungsmittels sowie die Berechnung der Abschirmung reaktiver Zentren durch die Umgebung. Eingesetzt wird hierfür die so genannte Dissipative Particle Dynamics (DPD) Methode, das ist ein mesoskopisches Verfahren, welches die Systemeigenschaften als Funktion der Zeit ermittelt und für realitätsnahe Simulationen sowohl statischer als auch dynamischer Eigenschaften geeignet ist. Die Simulationen erstrecken sich von der hochverdünnter Lösung über stärker konzentrierte Systeme von Homo- und Copolymeren (d.h., eine bzw. zwei Monomersorten) bis hin zum lösungsmittelfreien amorphen Polymer.



Gerhard Zifferer
Institut für Physikalische Chemie
Universität Wien

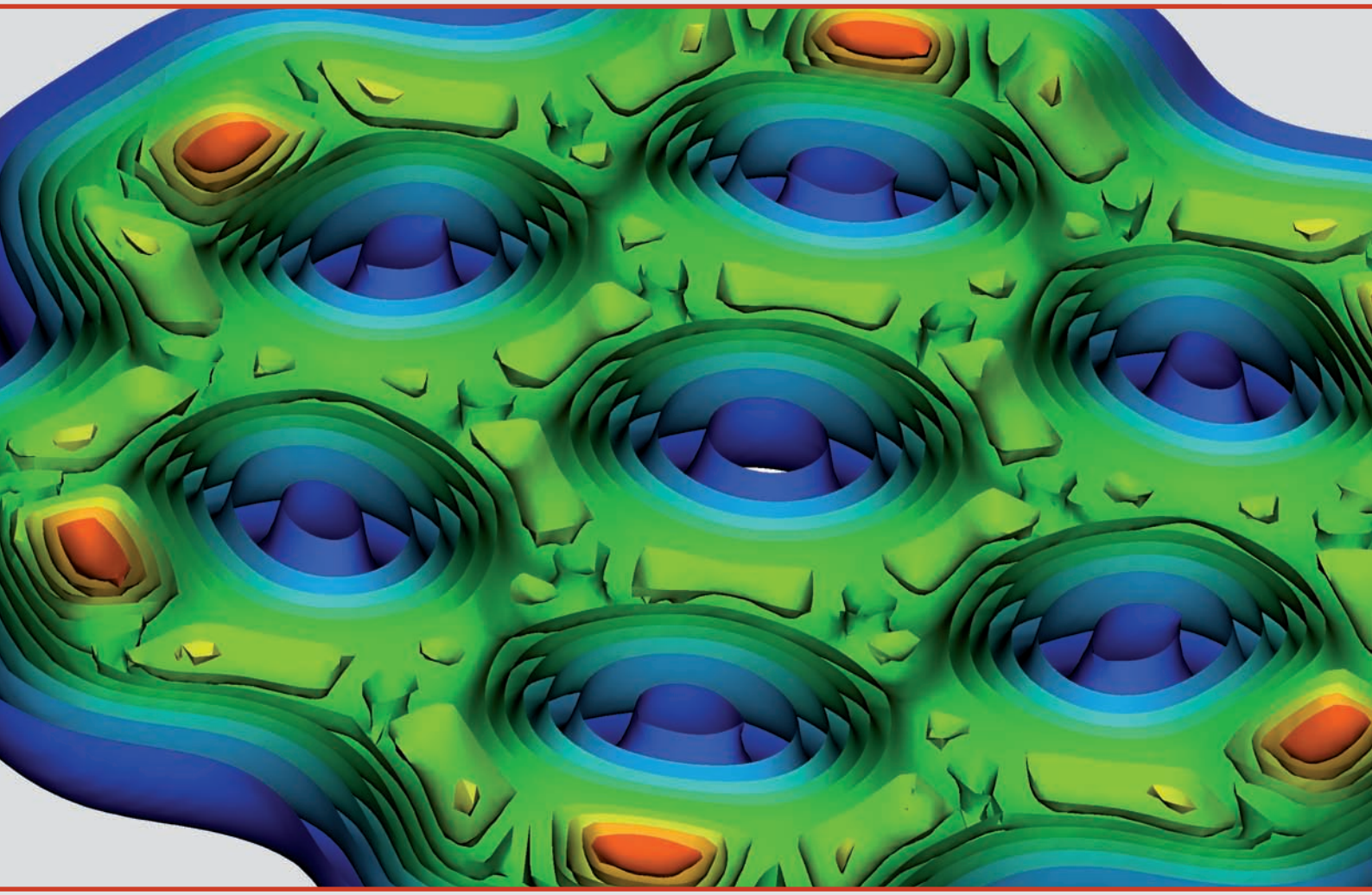
Übergangsmetall-Oxide: Atomgruppen und Einschlussverbindungen in Zeolithen

Übergangsmetalloxid-Gruppen ('Cluster') $(CoO)_2$ wurden untersucht mit Hilfe der Dichtefunktional-Theorie (im Programm Gaussian09). Die Reihenfolge der berechneten energetischen Zustände wurde bestätigt durch die CCSD(T)-Methode. Das rhombische Dioxid mit antiferromagnetisch angeordneten Elektronen der Kobalt-Zentren ergab sich als das globale Minimum. Die isomeren Peroxide sind vorwiegend kovalent. Die thermodynamische Stabilität betreffend Dissoziation zu CoO nimmt zu mit der Carbonilierung, wobei die Protonenaffinität und Reaktivität bei Abgabe von molekularem Sauerstoff ebenfalls zunimmt.
Die ONIOM Methode und periodische Randbedingungen wurden auf Zeolithe angewendet. Eine vollständige Optimierung mit einem vollständigen Basissatz aller Elektronen ist die Voraussetzung für eine zutreffende Aufklärung der räumlichen Anordnung der Übergangsmetall-Kationen durch die Sauerstoffatome im Kristallgitter.



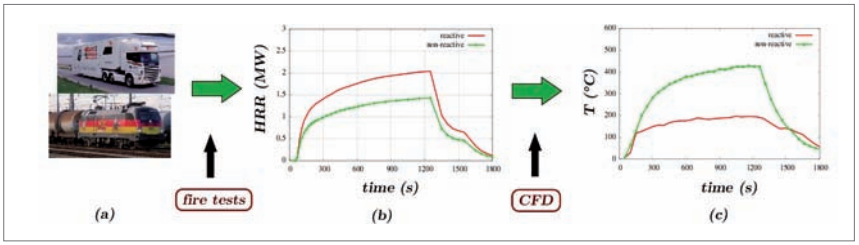
Hans Mikosch, Ellie L. Uzunova
Institut für Chemische Technologien und Analytik
Technische Universität Wien

Ingenieurwissenschaften



Entwicklung eines Strömungssimulations-Codes zur Vorhersage der thermischen Belastung von Strukturen unter Feuerlast

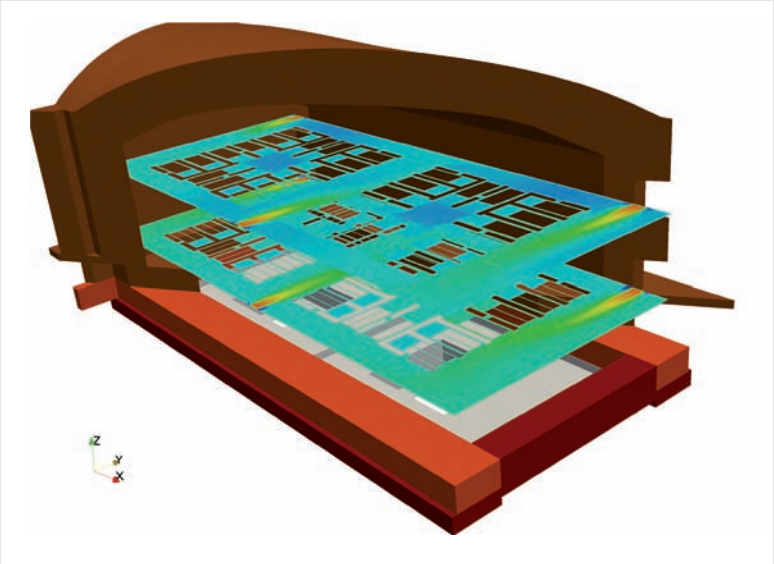
Die Brandbelastung von Tragkonstruktionen aus Beton und Stahl, ausgelöst durch Unfälle, verursacht erheblichen Schaden an der Tragstruktur von kritischen Infrastrukturbauten (z.B. Straßen- und Eisenbahntunnel, Brückentragwerke, unterirdische Kommunikationseinrichtungen etc.) und beeinträchtigt dadurch die Gebrauchstauglichkeit und Tragsicherheit der Struktur. Zur Bestimmung des Wärmeeintrages von der Feuerquelle in derartige Infrastrukturen im Katastrophenfall Brand, wird in diesem Projekt ein Strömungssimulations Code (Computational Fluid Dynamics (CFD)) entwickelt (siehe Abb. 1): ausgehend von dem zeitlichen Verlauf der Energiefreisetzungsrate (Heat Release Rate (HRR)) erlaubt die CFD-Analyse die Entwicklung der Temperaturen der dem Feuer zugewandten Oberflächen zu ermitteln und im Weiteren genormte Temperatur-Zeit Kurven zu ersetzen. Die Abbildung zeigt den Ansatz zur CFD-Simulation eines Brandereignisses in Hohlraumbauten: (a) Art der Brandlast, (b) zeitlichen Entwicklung der Energiefreisetzungsrate und (c) Entwicklung der Oberflächentemperatur.



Aram Amouzandeh, Matthias Zeiml und Roman Lackner
Institut für Mechanik der Werkstoffe und Strukturen
Technische Universität Wien

Efficient Dry and Burn

Dieses Projekt untersucht den Verbrennungsprozess von Feuerfestmaterialien in einem Batchofen bei hohen Temperaturen. Es konnte festgestellt werden, dass eine leicht asymmetrische Bauweise Temperaturunterschiede an verschiedenen Stellen im Ofen bei der Produktion der Schamottesteine bedingt. Nach den Resultaten der durchgeführten Simulationen kann durch eine veränderte Anordnung des Produkts während des Brennprozesses eine Verbesserung von Gasgeschwindigkeits- und Temperaturverteilung im Ofen erreicht werden. Experimentelle Analysen der Endprodukte zeigten statistisch signifikante Verbesserungen der Produktqualität im Vergleich zu herkömmlichen Anordnungen. Dieses Projekt wird in Kooperation mit der RATH AG durchgeführt und von der FFG gefördert.

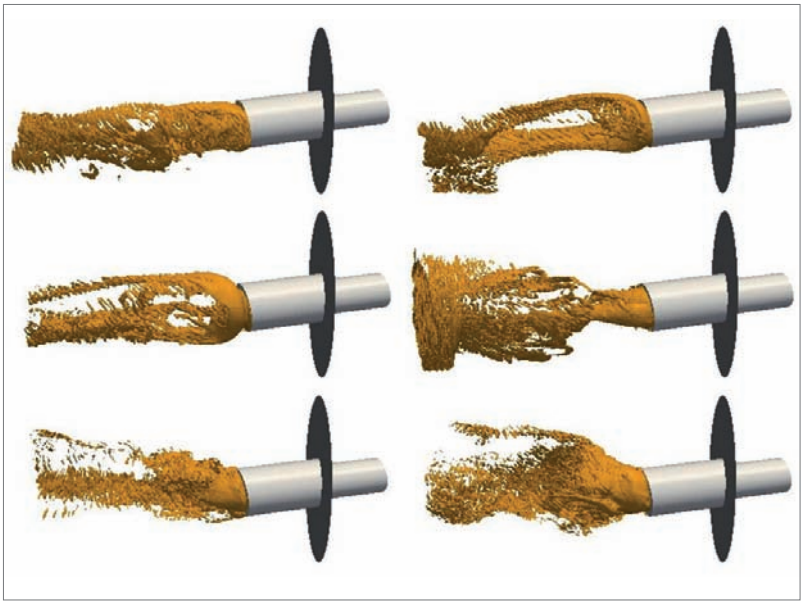


Grafik: Ofen-Geometrie mit der Temperaturverteilung an zwei Flächen auf Höhe der Zentren der Brenner.

Jozsef Nagy
Institut für Verfahrenstechnik, Umwelttechnik und Technische Biowissenschaften
Technische Universität Wien

New challenges for reducing agents in smelting reduction process

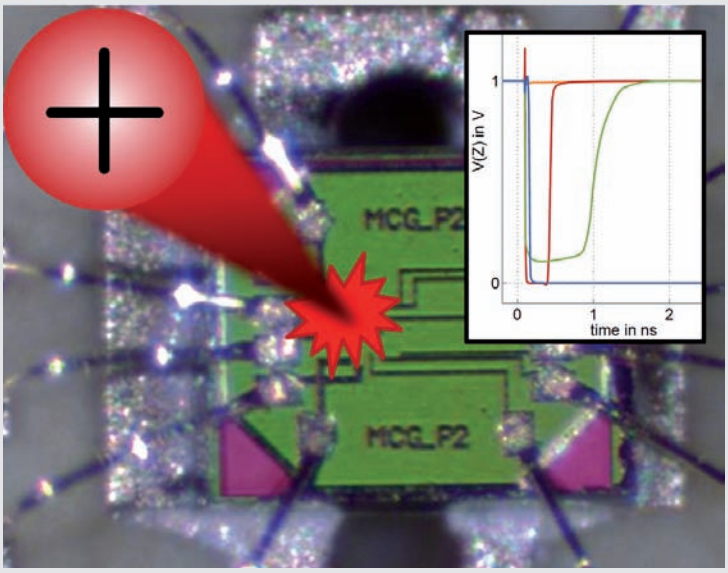
Im Projekt wird die Ölzerstäubung in einer gasförmigen Mantelströmung analysiert. Dabei werden die physikalischen Ursachen für die Aufweitung des Ölstrahls untersucht. Zuerst wird die stationäre einphasige Gasströmung simuliert, um eine gute Anfangsschätzung zu gewährleisten. Mit diesem Geschwindigkeits- und Druckprofil wird eine instationäre Mehrphasensimulation durchgeführt. Dabei werden vier unterschiedliche Betriebszustände analysiert um den Einfluss der Mantelströmung verstehen zu können. Für die feine Auflösung der Simulationen wird ein Rechengitter von über 17.500.000 Zellen benötigt. Um in realistischen Zeiten Ergebnisse zu erhalten, muss hoch parallel gerechnet werden, was ausschließlich auf dem VSC-2 möglich ist. Das Projekt findet im Rahmen des K1-MET-Netzwerks statt.



Jozsef Nagy
Institut für Verfahrenstechnik, Umwelttechnik und Technische Biowissenschaften
Technische Universität Wien

Projekt FATAL

Ziel unseres Projektes ist es, eine realistische Modellierungsumgebung für Strahlungseffekte in asynchronen digitalen Schaltungen zu entwickeln. Damit wird es in Zukunft möglich sein, derartige Effekte bereits beim Design von strahlungstoleranter Elektronik zu berücksichtigen. Dies ist besonders wichtig bei Satelliten und bei Flugzeugen, die unvermeidbar den Einflüssen kosmischer Strahlung ausgesetzt sind. Für die Erstellung des Modells sind einerseits Messungen in Teilchenbeschleunigern und andererseits 3D Simulationen notwendig. Simulationsmodelle stellen eine sehr leistungsfähige Möglichkeit zur Verfügung, in ein Bauteil wie einen Transistor „hineinzusehen" und somit ein detaillierteres Verständnis der Vorgänge beim Einschlag eines Teilchens zu erlangen. Allerdings sind dafür komplexe 3D-Halbleitersimulationen erforderlich, die enorme Rechenleistung beanspruchen.

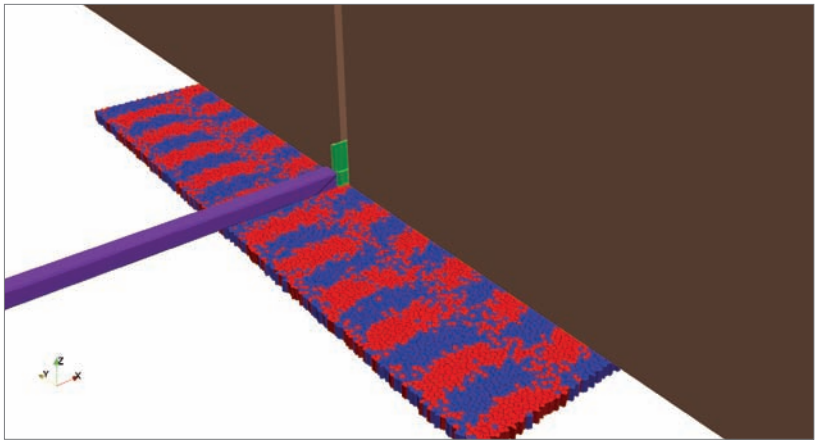


Michael Hofbauer, Kurt Schweiger, Horst Zimmermann, Ulrich Schmid
Institute of Electrodynamics, Microwave and Circuit Engineering
Technische Universität Wien

Simulation magnetischer Speichermedien

Zahlreiche Anwendungen wie Spintronik-Bauteile, GMR-Sensoren oder auch magnetische Speichermedien bestehen aus magnetischen Teilen von unterschiedlichster Größe. Diese reichen vom Nanometer- bis in den Millimeter-Bereich. Die beteiligten Zeitskalen erstrecken sich dabei von der Größenordnung von Nanosekunden, in der die interne Dynamik der beteiligten magnetische Momente abläuft, bis in den Bereich von Jahren, in dem die thermische Stabilität von magnetischen Strukturen liegt. In unserem Projekt entwickeln wir effiziente Methoden, um die Längenskalen der bisher existierenden mikromagnetischen Simulationen zu makroskopischer Größe auszuweiten und außerdem die berechenbaren Zeitskalen mit Hilfe einer statistischen Methode (Forward Flux Sampling) auf Jahre zu erweitern.

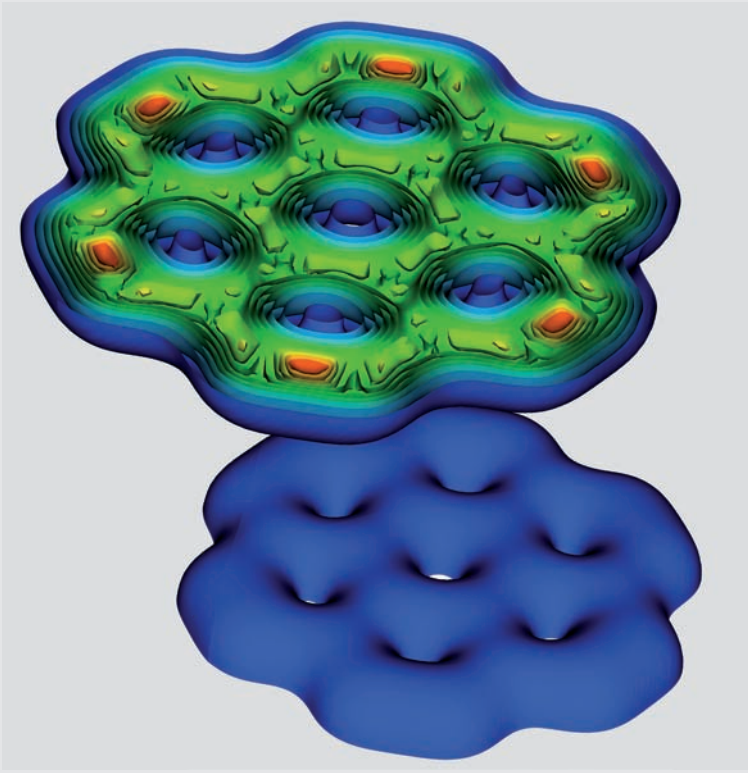
Christoph Vogler, Dieter Süss
Institut für Festkörperphysik
Technische Universität Wien



Die Abbildung zeigt das Finite Elemente Modell eines magnetischen Lesekopfes, der sich über eine Festplatte bewegt, welche aus magnetischen Körnern besteht. Die Größe des eigentlichen Lesekopfes (grün) liegt im Nanometer-Bereich, die magnetische Abschirmung von außen (braun) jedoch im Mikrometer-Bereich. Die einzelnen Körner der Festplatte haben eine thermische Stabilität von Jahren, wobei die interne magnetische Dynamik in der Größenordnung von Nanosekunden liegt.

Tribologie

Obwohl sich die Wissenschaft seit hunderten Jahren mit den tribologischen Problemen von Reibung, Schmierung und Verschleiß beschäftigt, sind viele fundamentale Fragen noch ungelöst. Das Ziel dieses Projekts ist die Beschreibung und Erforschung von Reibungsproblemen auf der atomaren Ebene mithilfe quantenmechanischer Berechnungen. Besondere Beachtung wird dem Phänomen der strukturellen Superlubrizität geschenkt, bei dem vermutet wird, dass die Reibkräfte um Größenordnungen sinken oder gar verschwinden.



Michael Wolloch, Peter Mohn,
Josef Redinger, Andras Vernes
Institut für Angewandte Physik
Technische Universität Wien

Impressum

Offenlegung gemäß § 25 Mediengesetz
Informationsbroschüre des VSC Projekts

Herausgeber

Zentraler Informatikdienst der Universität Wien
Universitätsstraße 7, 1010 Wien

Zentraler Informatikdienst der
Technische Universität Wien
Wiedner Hauptstraße 8-10, 1040 Wien

Zentraler Informatikdienst der
Universität für Bodenkultur
Peter-Jordan-Straße 82, 1190 Wien

Redaktion

Dipl.-Ing. Dr.techn. Jan Zabloudil
jan.zabloudil@boku.ac.at

Koordination

Christian Kracher
christian.kracher@univie.ac.at

Design und Layout

Elisabeth Frischengruber
Visuelle Gestaltung
frischengruber.net

Wir bedanken uns bei allen Wissenschaftern dafür, dass sie sich Zeit genommen und die Mühe gemacht haben, Beiträge für diese Publikation zu verfassen und für alle zur Verfügung gestellten Bildmaterialien.

Kontaktinformationen

Vienna Scientific Cluster
vsc@tuwien.ac.at
http://vsc.ac.at

Benutzervertreter des Steering Committee

Univ.-Prof. Mag. Dr. Christoph Dellago
Dekan der Fakultät für Physik
Universität Wien
1090 Wien, Strudlhofgasse 4
christoph.dellago@univie.ac.at

Ao.Univ.Prof. Dr.phil. Herbert Störi
Vorstand des Instituts für Angewandte Physik
Technische Universität Wien
1040 Wien, Wiedner Hauptstraße 8-10/134
herbert.stoeri@tuwien.ac.at

Für den Betrieb verantwortlich

Dipl.-Ing. Dr.techn. Ernst Haunschmid
Leiter High Performance Computing
Zentraler Informatikdienst
Technische Universität Wien
1040 Wien, Wiedner Hauptstraße 8-10/020
ernst.haunschmid@tuwien.ac.at

Mai 2012



VIENNA SCIENTIFIC CLUSTER

TECHNISCHE UNIVERSITÄT WIEN
Vienna University of Technology

universität wien

BOKU UNIVERSITÄT FÜR BODENKULTUR WIEN